

09/937631
Bescheinigung

69 00/2292
4

Die Bayer AG in Leverkusen/Deutschland hat eine Patentanmeldung unter der Bezeichnung

"Substituierte Benzoylpyrazole"

am 27. März 1999 beim Deutschen Patent- und Markenamt eingereicht.

Das angeheftete Stück ist eine richtige und genaue Wiedergabe der ursprünglichen Unterlage dieser Patentanmeldung.

Die Anmeldung hat im Deutschen Patent- und Markenamt vorläufig die Symbole C 07 D und A 01 N der Internationalen Patentklassifikation erhalten.

München, den 17. Januar 2000

Deutsches Patent- und Markenamt

Der Präsident

Im Auftrag

Jerofsky

Aktenzeichen: 199 14 140.1

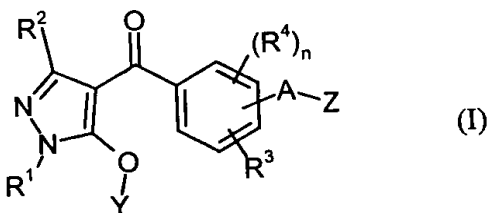
PRIORITY DOCUMENT
SUBMITTED OR TRANSMITTED IN
COMPLIANCE WITH
RULE 17.1(a) OR (b)

Substituierte Benzoylpyrazole

Die Erfindung betrifft neue substituierte Benzoylpyrazole, Verfahren zu ihrer Herstellung und ihre Verwendung als Herbizide.

Es ist bereits bekannt, daß bestimmte substituierte Benzoylpyrazole herbizide Eigenschaften aufweisen (vgl. EP-A-352543, WO-A-96/26206, WO-A-97/35850, WO-A-97/41105, WO-A-97/41116, WO-A-97/41117, WO-A-97/41118, WO-A-97/46530, WO-A-98/28981, WO-A-98/31681, WO-A-98/31682, WO-A-99/07697). Die Wirkung dieser Verbindungen ist jedoch nicht in allen Belangen zufriedenstellend.

Es wurden nun die neuen substituierten Benzoylpyrazole der allgemeinen Formel (I),



in welcher

n für die Zahlen 0, 1, 2 oder 3 steht,

A für eine Einfachbindung oder für Alkandiyl (Alkylen) steht,

R¹ für jeweils gegebenenfalls substituiertes Alkyl, Alkenyl, Alkinyl oder Cycloalkyl steht,

R² für Wasserstoff, Cyano, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, oder für jeweils gegebenenfalls substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylthio, Alkoxy-carbonyl oder Cycloalkyl steht,

5 R³ für Wasserstoff, Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, oder für jeweils gegebenenfalls substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylthio, Alkylsulfinyl, Alkylsulfonyl, Alkylamino, Dialkylamino oder Dialkylaminosulfonyl steht,

10 R⁴ für Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, oder für jeweils gegebenenfalls substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylthio, Alkylsulfinyl, Alkylsulfonyl, Alkylamino, Dialkylamino oder Dialkylaminosulfonyl steht,

15 Y für Wasserstoff oder für jeweils gegebenenfalls substituiertes Alkyl, Alkylcarbonyl, Alkoxy carbonyl, Alkylsulfonyl, Alkylaminocarbonyl, Dialkylaminocarbonyl, Alkenyl, Alkenylcarbonyl, Alkenylsulfonyl, Alkinyl, Alkinylcarbonyl, Cycloalkyl, Cycloalkylcarbonyl, Cycloalkylalkyl, Phenylcarbonyl, Phenylsulfonyl, Phenylalkyl oder Phenylcarbonylalkyl steht, und

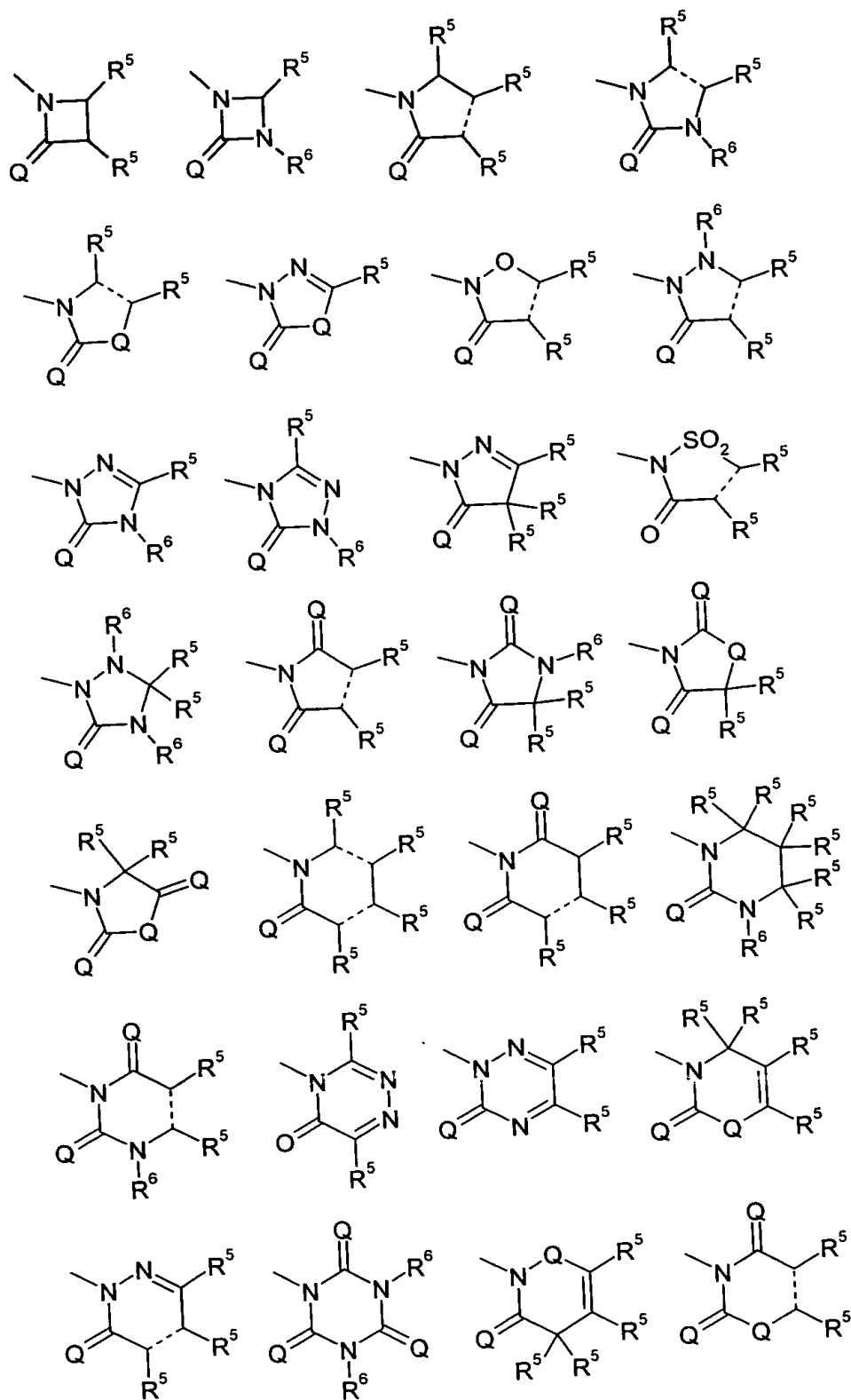
20 Z für eine gegebenenfalls substituierte 4- bis 12-gliedrige, gesättigte oder ungesättigte, monocyclische oder bicyclische, heterocyclische Gruppierung steht, welche 1 bis 4 Heteroatome (bis zu 4 Stickstoffatome und gegebenenfalls - alternativ oder additiv - ein Sauerstoffatom oder ein Schwefelatom, oder eine SO-Gruppierung oder eine SO₂-Gruppierung) enthält, und welche zusätzlich ein bis drei Oxo-Gruppen (C=O) und/oder Thioxo-Gruppen (C=S) als Bestandteile des Heterocyclus enthält,

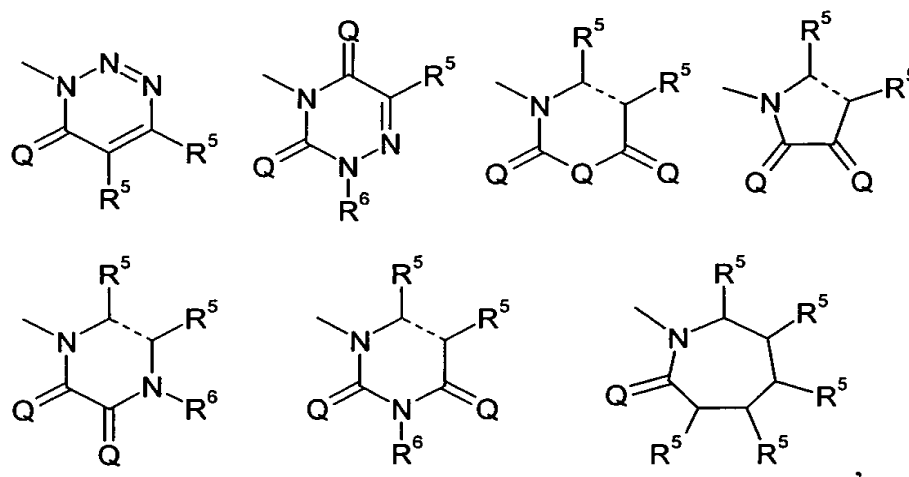
25 - einschließlich aller möglichen tautomeren Formen der Verbindungen der allgemeinen Formel (I) und der möglichen Salze der Verbindungen der allgemeinen Formel (I) - gefunden.

30 In den Definitionen sind die Kohlenwasserstoffketten, wie Alkyl oder Alkandiyl - auch in Verbindung mit Heteroatomen, wie in Alkoxy - jeweils geradkettig oder verzweigt;

- n steht bevorzugt für die Zahlen 0, 1 oder 2;
- 5 A steht bevorzugt für eine Einfachbindung oder für Alkandiyl (Alkylen) mit 1 bis 4 Kohlenstoffatomen;
- 10 R¹ steht bevorzugt für gegebenenfalls durch Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Halogen, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkyl-carbonyl, C₁-C₄-Alkoxy-carbonyl, C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Alkylsulfinyl oder C₁-C₄-Alkylsulfonyl substituiertes Alkyl mit 1 bis 6 Kohlenstoffatomen, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Halogen oder C₁-C₄-Alkoxy-carbonyl substituiertes Alkenyl oder Alkinyl mit jeweils 2 bis 6 Kohlenstoffatomen, oder für gegebenenfalls durch Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Halogen, C₁-C₄-Alkyl oder C₁-C₄-Alkoxy-carbonyl substituiertes Cycloalkyl mit 3 bis 6 Kohlenstoffatomen;
- 15
- 20 R² steht bevorzugt für Wasserstoff, Cyano, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Halogen oder C₁-C₄-Alkoxy substituiertes Alkyl, Alkoxy oder Alkoxy-carbonyl mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen, für gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Alkylthio mit 1 bis 6 Kohlenstoffatomen, oder für gegebenenfalls durch Cyano, Halogen oder C₁-C₄-Alkyl substituiertes Cycloalkyl mit 3 bis 6 Kohlenstoffatomen;
- 25 R³ steht bevorzugt für Wasserstoff, Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Alkylsulfinyl oder C₁-C₄-Alkylsulfonyl substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylthio, Alkylsulfinyl oder Alkylsulfonyl mit jeweils bis zu 4 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen, oder für Alkylamino, Dialkylamino oder Dialkylaminosulfonyl mit jeweils bis zu 4 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen;
- 30

- 5 R⁴ steht bevorzugt für Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Alkylsulfinyl oder C₁-C₄-Alkylsulfonyl substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylthio, Alkylsulfinyl oder Alkylsulfonyl mit jeweils bis zu 4 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen, oder für Alkylamino, Dialkylamino oder Dialkylaminosulfonyl mit jeweils bis zu 4 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen;
- 10 Y steht bevorzugt für Wasserstoff, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Halogen oder C₁-C₄-Alkoxycarbonyl substituiertes Alkyl, Alkylcarbonyl oder Alkoxycarbonyl mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Alkylsulfonyl, Alkylaminocarbonyl oder Dialkylaminocarbonyl mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Halogen oder C₁-C₄-Alkoxy-carbonyl substituiertes Alkenyl, Alkenylcarbonyl, Alkinyl oder Alkinylcarbonyl mit jeweils 2 bis 6 Kohlenstoffatomen, für gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Alkenylsulfonyl mit bis zu 6 Kohlenstoffatomen für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Halogen oder C₁-C₄-Alkyl substituiertes Cycloalkyl, Cycloalkylcarbonyl oder Cycloalkylalkyl mit jeweils 3 bis 6 Kohlenstoffatomen in den Cycloalkylgruppen und gegebenenfalls 1 bis 3 Kohlenstoffatomen im Alkylteil, oder für jeweils gegebenenfalls durch Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Halogen, C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy oder C₁-C₄-Halogenalkoxy substituiertes Phenylcarbonyl, Phenylsulfonyl, Phenyl-C₁-C₄-alkyl oder Phenylcarbonyl-C₁-C₄-alkyl;
- 25 Z steht bevorzugt für eine der nachstehenden heterocyclischen Gruppierungen





worin jeweils die gestrichelt gezeichnete Bindung eine Einfachbindung oder eine Doppelbindung ist,

Q für Sauerstoff oder Schwefel steht,

R⁵ für Wasserstoff, Hydroxy, Mercapto, Cyano, Halogen, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Halogen, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Alkylsulfinyl oder C₁-C₄-Alkylsulfonyl substituiertes Alkyl, Alkylcarbonyl, Alkoxy, Alkoxycarbonyl, Alkylthio, Alkylsulfinyl oder Alkylsulfonyl mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen, für Propadienylthio, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Alkylamino oder Dialkylamino mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Alkenyl, Alkynyl, Alkenyloxy, Alkenylthio oder Alkenylamino mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen in den Alkenyl- bzw. Alkynylgruppen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Cycloalkyl, Cycloalkyloxy, Cycloalkylthio, Cycloalkylamino, Cycloalkylalkyl, Cycloalkylalkoxy, Cycloalkylalkylthio oder Cycloalkylalkylamino mit jeweils 3 bis 6 Kohlenstoffatomen in den Cycloalkylgruppen und gegebenen-

falls bis zu 4 Kohlenstoffatomen im Alkylteil, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen, C₁-C₄-Alkyl oder C₁-C₄-Alkoxy substituiertes Phenyl, Phenyloxy, Phenylthio, Phenylamino, Benzyl, Benzyloxy, Benzylthio oder Benzylamino steht, für Pyrrolidino, Piperidino oder Morpholino steht, oder - für den Fall, daß zwei benachbarte Reste R⁵ und R⁵ sich an einer Doppelbindung befinden - zusammen mit dem benachbarten Rest R⁵ auch für eine Benzogruppierung steht, und

R⁶ für Wasserstoff, Hydroxy, Amino, Alkylidenamino mit bis zu 4 Kohlenstoffatomen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen oder C₁-C₄-Alkoxy substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylamino, Dialkylamino oder Alkanoylamino mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Alkenyl, Alkynyl oder Alkenyloxy mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen in den Alkenyl- bzw. Alkynylgruppen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Cycloalkyl, Cycloalkylalkyl oder Cycloalkylamino mit jeweils 3 bis 6 Kohlenstoffatomen in den Cycloalkylgruppen und gegebenenfalls bis zu 3 Kohlenstoffatomen im Alkylteil, oder für jeweils gegebenenfalls durch Halogen, C₁-C₄-Alkyl oder C₁-C₄-Alkoxy substituiertes Phenyl oder Benzyl steht, oder zusammen mit einem benachbarten Rest R⁵ oder R⁶ für gegebenenfalls durch Halogen oder C₁-C₄-Alkyl substituiertes Alkandiyl mit 3 bis 5 Kohlenstoffatomen steht,

wobei die einzelnen Reste R⁵ und R⁶ - soweit mehrere davon an gleiche heterocyclische Gruppierungen gebunden sind, gleiche oder verschiedene Bedeutungen im Rahmen der obigen Definition haben können;

Q steht bevorzugt für Sauerstoff;

R⁵ steht bevorzugt für Wasserstoff, Hydroxy, Mercapto, Cyano, Fluor, Chlor, Brom, Iod, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor, Chlor, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, n-, i-, s- oder t-Butoxy, Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, n-, i-, s- oder t-Butylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, n- oder i-Propylsulfinyl, Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n- oder i-Propylsulfonyl substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, n-, i-, s- oder t-Butoxy, Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, n-, i-, s- oder t-Butylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, n- oder i-Propylsulfinyl, Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n- oder i-Propylsulfonyl, für Methylamino, Ethylamino, n- oder i-Propylamino, n-, i-, s- oder t-Butylamino, Dimethylamino, Diethylamino, Di-n-propylamino oder Di-i-propylamino, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor substituiertes Ethenyl, Propenyl, Butenyl, Ethinyl, Propinyl, Butinyl, Propenyloxy, Butenyloxy, Propenylthio, Butenylthio, Propenylamino oder Butenylamino, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor substituiertes Cyclopropyl, Cyclobutyl, Cyclopentyl, Cyclohexyl, Cyclopropyloxy, Cyclobutyloxy, Cyclopentyloxy, Cyclohexyloxy, Cyclopropylthio, Cyclobutylthio, Cyclopentylthio, Cyclohexylthio, Cyclopropylamino, Cyclobutylamino, Cyclopentylamino, Cyclohexylamino, Cyclopropylmethyl, Cyclobutylmethyl, Cyclopentylmethyl, Cyclohexylmethyl, Cyclopropylmethoxy, Cyclobutylmethoxy, Cyclopentylmethoxy, Cyclohexylmethoxy, Cyclopropylmethylthio, Cyclobutylmethylthio, Cyclopentylmethylthio, Cyclohexylmethylthio, Cyclopropylmethylamino, Cyclobutylmethylamino, Cyclopentylmethylamino oder Cyclohexylmethylamino, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor, Chlor, Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy substituiertes Phenyl, Phenyloxy, Phenylthio, Phenylamino, Benzyl, Benzyloxy, Benzylthio oder Benzylamino, für Pyrrolidino, Piperidino oder Morpholino steht, oder - für den Fall, daß

zwei benachbarte Reste R^5 und R^5 sich an einer Doppelbindung befinden - zusammen mit dem benachbarten Rest R^5 auch für eine Benzogruppierung;

5

R^6 steht bevorzugt für Wasserstoff, Hydroxy, Amino, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor, Methoxy oder Ethoxy substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i- oder s-Butyl, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, Methylamino, Ethylamino oder Dimethylamino, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor substituiertes Ethenyl, Propenyl, Ethinyl, Propinyl oder Propenyloxy, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor substituiertes Cyclopropyl, Cyclobutyl, Cyclopentyl, Cyclohexyl, Cyclopropylmethyl, Cyclobutylmethyl, Cyclopentylmethyl, Cyclohexylmethyl, oder für jeweils gegebenenfalls durch Fluor, Chlor, Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy substituiertes Phenyl oder Benzyl steht, oder zusammen mit einem benachbarten Rest R^5 oder R^6 für jeweils gegebenenfalls durch Methyl und/oder Ethyl substituiertes Propan-1,3-diyl (Trimethylen), Butan-1,4-diyl (Tetramethylen) oder Pentan-1,5-diyl (Pentamethylen).

10

15

20

n steht besonders bevorzugt für die Zahlen 0 oder 1;

A steht besonders bevorzugt für eine Einfachbindung, Methylen, Ethyliden (Ethan-1,1-diyl) oder Dimethylen (Ethan-1,2-diyl);

25

R^1 steht besonders bevorzugt für jeweils gegebenenfalls durch Fluor, Chlor, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, n- oder i-Propylsulfinyl, Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n- oder i-Propylsulfonyl substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor, Chlor oder Brom substituiertes Propenyl, Butenyl, Propinyl oder Butinyl, oder für

30

jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Fluor, Chlor, Brom, Methyl oder Ethyl substituiertes Cyclopropyl, Cyclobutyl, Cyclopentyl oder Cyclohexyl;

5 R² steht besonders bevorzugt für Wasserstoff, Cyano, Carbamoyl, Thio-
carbamoyl, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Fluor, Chlor, Methoxy
oder Ethoxy substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-
Butyl, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, Methoxycarbonyl, Ethoxy-
carbonyl, n- oder i-Propoxycarbonyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor
und/oder Chlor substituiertes Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, oder
10 für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Fluor, Chlor, Brom, Methyl oder
Ethyl substituiertes Cyclopropyl, Cyclobutyl, Cyclopentyl oder Cyclohexyl;

15 R³ steht besonders bevorzugt für Wasserstoff, Nitro, Cyano, Carboxy,
Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Fluor, Chlor, Brom, Iod, für jeweils gegeben-
enfalls durch Fluor und/oder Chlor, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy,
Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl,
Methylsulfonyl oder Ethylsulfonyl substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-
Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder
Chlor, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy substituiertes Methoxy, Ethoxy,
20 n- oder i-Propoxy, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor
substituiertes Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, Methylsulfinyl,
Ethylsulfinyl, n- oder i-Propylsulfinyl, Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n- oder
i-Propylsulfonyl, oder für Methylamino, Ethylamino, n- oder i-Propylamino,
Dimethylamino, Diethylamino, Dimethylaminosulfonyl oder Diethylamino-
25 sulfonyl;

30 R⁴ steht besonders bevorzugt für Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Thio-
carbamoyl, Fluor, Chlor, Brom, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor
und/oder Chlor, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, Methylthio, Ethylthio,
n- oder i-Propylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, Methylsulfonyl oder
Ethylsulfonyl substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-

5 Butyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy substituiertes Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor substituiertes Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, n- oder i-Propylsulfinyl, Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n- oder i-Propylsulfonyl, oder für Methylamino, Ethylamino, n- oder i-Propylamino, Dimethylamino, Diethylamino, Dimethylaminosulfonyl oder Diethylaminosulfonyl;

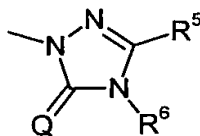
10 R⁵ steht besonders bevorzugt für Wasserstoff, Hydroxy, Chlor, Brom, Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, Difluormethyl, Dichlormethyl, Trifluormethyl, Trichlormethyl, Chlordifluormethyl, Fluordichlormethyl, Fluorethyl, Chlorethyl, Difluorethyl, Dichlorethyl, Fluor-n-propyl, Fluor-i-propyl, Chlor-n-propyl, Chlor-i-propyl, Methoxymethyl, Ethoxymethyl, Methoxyethyl, Ethoxyethyl, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, n-, i-, s- oder t-Butoxy, Fluorethoxy, Chlorethoxy, Difluorethoxy, Dichlorethoxy, Tri-
15 fluorethoxy, Trichlorethoxy, Chlorfluorethoxy, Chlordifluorethoxy, Fluordichlorethoxy, Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, Fluorethylthio, Chlorethylthio, Difluorethylthio, Dichlorethylthio, Chlorfluorethylthio, Chlordifluorethylthio, Fluordichlorethylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, n- oder i-Propylsulfinyl, Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n- oder i-Propylsulfonyl, Dimethylamino, Propenylthio, Butenylthio, Propinylthio, Butinylthio, Cyclopropyl, Cyclopropylmethyl, Cyclopropylmethoxy, Phenyl oder
20 Phenoxy;

25 R⁶ steht besonders bevorzugt für Amino, Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, Methoxy, Ethoxy, Methylamino, Dimethylamino, Cyclopropyl oder Cyclopropylmethyl steht, oder zusammen mit R⁵ für Propan-1,3-diyl (Trimethylen), Butan-1,4-diyl (Tetramethylen) oder Pentan-1,5-diyl (Pentamethylen);

Y steht besonders bevorzugt für Wasserstoff, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Fluor, Chlor, Methoxy oder Ethoxy substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, Acetyl, Propionyl, n- oder i-Butyryl, Methoxycarbonyl oder Ethoxycarbonyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor, Chlor und/oder Brom substituiertes Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n- oder i-Propylsulfonyl, n-, i-, s- oder t-Butylsulfonyl, Methylaminocarbonyl, Ethylaminocarbonyl, n- oder i-Propylaminocarbonyl, Dimethylaminocarbonyl oder Diethylaminocarbonyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor, Chlor oder Brom substituiertes Propenyl, Butenyl, Propenylcarbonyl, Butenylcarbonyl, Propenylsulfonyl, Butenylsulfonyl, Propinyl, Butinyl, Propinylcarbonyl oder Butinylcarbonyl, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Fluor, Chlor, Methyl oder Ethyl substituiertes Cyclopropyl, Cyclobutyl, Cyclopentyl, Cyclohexyl, Cyclopropylcarbonyl, Cyclobutylcarbonyl, Cyclopentylcarbonyl, Cyclohexylcarbonyl, Cyclopropylmethyl, Cyclobutylmethyl, Cyclopentylmethyl oder Cyclohexylmethyl, oder für jeweils gegebenenfalls durch Nitro, Cyano, Fluor, Chlor, Brom, Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, Trifluormethyl, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, Difluormethoxy oder Trifluormethoxy substituiertes Phenylcarbonyl, Phenylsulfonyl, Benzyl oder Phenylcarbonylmethyl;

20

Z steht besonders bevorzugt für



25 n steht ganz besonders bevorzugt für 0;

A steht ganz besonders bevorzugt für eine Einfachbindung oder für Methylene;

- 5 R¹ steht ganz besonders bevorzugt für jeweils gegebenenfalls durch Fluor, Chlor, Methoxy, Ethoxy, Methylthio, Ethylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, Methylsulfonyl oder Ethylsulfonyl substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, oder für gegebenenfalls durch Cyano, Fluor, Chlor, Brom, Methyl oder Ethyl substituiertes Cyclopropyl;
- 10 R² steht ganz besonders bevorzugt für Wasserstoff, Cyano, Carbamoyl, Fluor, Chlor, Brom, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Fluor, Chlor, Methoxy oder Ethoxy substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, Methoxycarbonyl, Ethoxycarbonyl, n- oder i-Propoxycarbonyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor substituiertes Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, oder für Cyclopropyl;
- 15 R³ steht ganz besonders bevorzugt für Wasserstoff, Nitro, Cyano, Fluor, Chlor, Brom, Iod, Methyl, Ethyl, Trifluormethyl, Methoxymethyl, Methylthio-methyl, Methylsulfinylmethyl, Methylsulfonylmethyl, Methoxy, Ethoxy, Di-fluormethoxy, Trifluormethoxy, Methylthio, Ethylthio, Methylsulfinyl, Ethyl-sulfinyl, Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl oder Dimethylaminosulfonyl;
- 20 R⁴ steht besonders bevorzugt für Nitro, Cyano, Fluor, Chlor, Brom, Methyl, Ethyl, Trifluormethyl, Methoxymethyl, Methylthiomethyl, Methylsulfinyl-methyl, Methylsulfonylmethyl, Methoxy, Ethoxy, Difluormethoxy, Trifluor-methoxy, Methylthio, Ethylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, Methyl-sulfonyl, Ethylsulfonyl, Dimethylamino oder Dimethylaminosulfonyl;
- 25 R⁶ steht ganz besonders bevorzugt für Methyl, Cyclopropyl, Dimethylamino, Methoxy oder Ethoxy;
- 30 Y steht ganz besonders bevorzugt für Wasserstoff;

A steht am meisten bevorzugt für Methylen;

R¹ steht am meisten bevorzugt für Methyl oder Ethyl;

5

R² steht am meisten bevorzugt für Wasserstoff oder Methyl;

R³ steht am meisten bevorzugt für Wasserstoff, Fluor, Chlor, Brom, Trifluormethyl oder Methylsulfonyl;

10

R⁴ steht am meisten bevorzugt für (2-)Chlor, (4-)Chlor, (6-)Trifluormethyl oder (2-)Methylsulfonyl.

15

Erfindungsgemäß bevorzugt sind die Verbindungen der Formel (I), in welchen eine Kombination der vorstehend als bevorzugt aufgeführten Bedeutungen vorliegt.

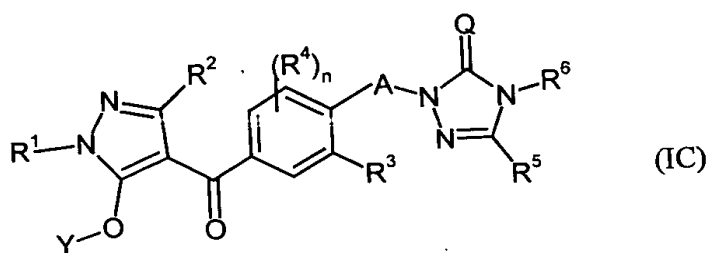
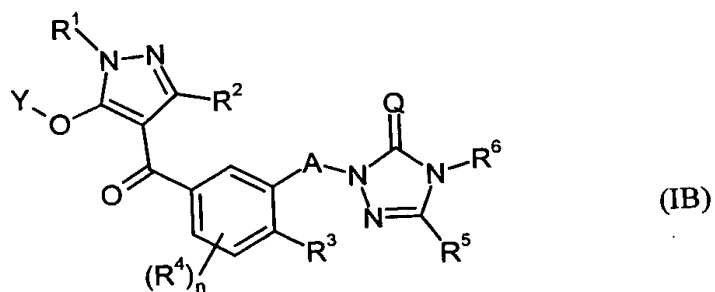
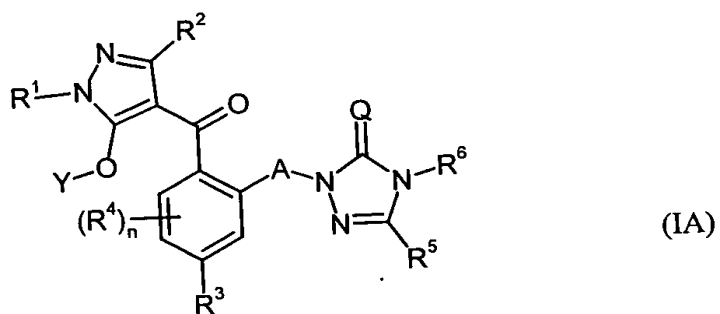
20

Erfindungsgemäß besonders bevorzugt sind die Verbindungen der Formel (I), in welchen eine Kombination der vorstehend als besonders bevorzugt aufgeführten Bedeutungen vorliegt.

25

Erfindungsgemäß am meisten bevorzugt sind die Verbindungen der Formel (I), in welchen eine Kombination der vorstehend als am meisten bevorzugt aufgeführten Bedeutungen vorliegt.

Die Verbindungen der allgemeinen Formeln (IA), (IB) und (IC) sind insbesondere Gegenstand der vorliegenden Erfindung:



in welchen

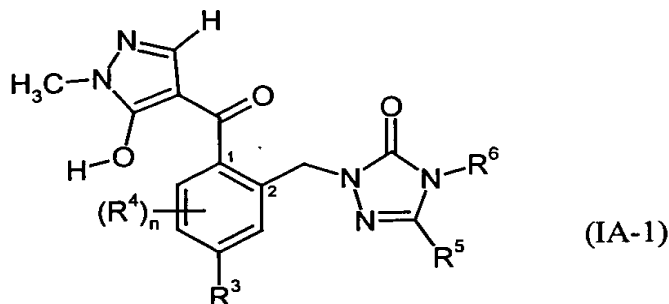
- 15 n, A, Q, R¹, R², R³, R⁴, R⁵, R⁶ und Y die vorausgehend angegebene Bedeutung haben.

Gegenstand der Erfindung sind vorzugsweise auch Natrium-, Kalium-, Magnesium-, Calcium-, Ammonium-, C₁-C₄-Alkyl-ammonium-, Di-(C₁-C₄-alkyl)-ammonium-, Tri-(C₁-C₄-alkyl)-ammonium-, Tetra-(C₁-C₄-alkyl)-ammonium, Tri-(C₁-C₄-alkyl)-sulfonium-, C₅- oder C₆-Cycloalkyl-ammonium- und Di-(C₁-C₂-alkyl)-benzyl-ammonium-Salze von Verbindungen der Formel (I), in welcher n, A, R¹, R², R³, R⁴, Y und Z die oben angegebenen Bedeutungen haben.

Die oben aufgeführten allgemeinen oder in Vorzugsbereichen aufgeführten Restdefinitionen gelten sowohl für die Endprodukte der Formel (I) als auch entsprechend für die jeweils zur Herstellung benötigten Ausgangs- oder Zwischenprodukte. Diese Restdefinitionen können untereinander, also auch zwischen den angegebenen bevorzugten Bereichen beliebig kombiniert werden.

Beispiele für die erfindungsgemäßen Verbindungen der allgemeinen Formel (I) sind in den nachstehenden Gruppen aufgeführt.




Gruppe 1














R³, (R⁴)_n, R⁵ und R⁶ haben hierbei beispielhaft die in der nachstehenden Tabelle angegebenen Bedeutungen:

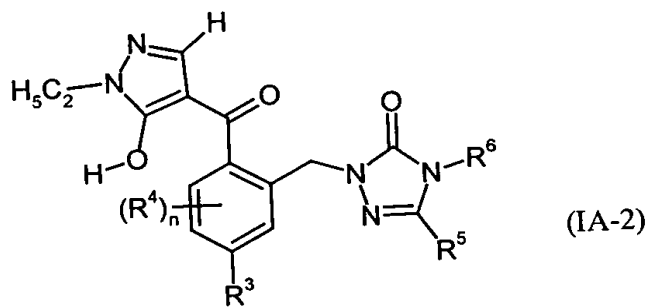
R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
H	-	CF_3	CH_3
F	-	CF_3	CH_3
Cl	-	CF_3	CH_3
Br	-	CF_3	CH_3
I	-	CF_3	CH_3
NO_2	-	CF_3	CH_3
CN	-	CF_3	CH_3
CH_3	-	CF_3	CH_3
OCH_3	-	CF_3	CH_3
CF_3	-	CF_3	CH_3
$OCHF_2$	-	CF_3	CH_3
OCF_3	-	CF_3	CH_3
SO_2CH_3	-	CF_3	CH_3
H	-	OCH_3	CH_3
F	-	OCH_3	CH_3
Cl	-	OCH_3	CH_3
Br	-	OCH_3	CH_3
I	-	OCH_3	CH_3
NO_2	-	OCH_3	CH_3
CN	-	OCH_3	CH_3
CH_3	-	OCH_3	CH_3
OCH_3	-	OCH_3	CH_3
CF_3	-	OCH_3	CH_3

R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
OCHF ₂	-	OCH ₃	CH ₃
OCF ₃	-	OCH ₃	CH ₃
SO ₂ CH ₃	-	OCH ₃	CH ₃
H	-	SCH ₃	CH ₃
F	-	SCH ₃	CH ₃
Cl	-	SCH ₃	CH ₃
Br	-	SCH ₃	CH ₃
I	-	SCH ₃	CH ₃
NO ₂	-	SCH ₃	CH ₃
CN	-	SCH ₃	CH ₃
CH ₃	-	SCH ₃	CH ₃
OCH ₃	-	SCH ₃	CH ₃
CF ₃	-	SCH ₃	CH ₃
OCHF ₂	-	SCH ₃	CH ₃
OCF ₃	-	SCH ₃	CH ₃
SO ₂ CH ₃	-	SCH ₃	CH ₃
H	-	OC ₂ H ₅	CH ₃
F	-	OC ₂ H ₅	CH ₃
Cl	-	OC ₂ H ₅	CH ₃
Br	-	OC ₂ H ₅	CH ₃
I	-	OC ₂ H ₅	CH ₃
NO ₂	-	OC ₂ H ₅	CH ₃
CN	-	OC ₂ H ₅	CH ₃
CH ₃	-	OC ₂ H ₅	CH ₃

R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
OCH ₃	-	OC ₂ H ₅	CH ₃
CF ₃	-	OC ₂ H ₅	CH ₃
OCHF ₂	-	OC ₂ H ₅	CH ₃
OCF ₃	-	OC ₂ H ₅	CH ₃
SO ₂ CH ₃	-	OC ₂ H ₅	CH ₃
H	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
F	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
Cl	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
Br	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
I	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
NO ₂	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
CN	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
CH ₃	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
OCH ₃	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
CF ₃	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
OCHF ₂	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
OCF ₃	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
SO ₂ CH ₃	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃
H	-	OCH ₃	
F	-	OCH ₃	
Cl	-	OCH ₃	

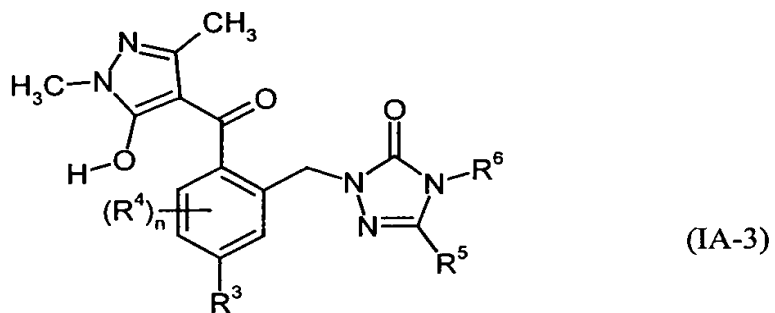
R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
Br	-	OCH ₃	
I	-	OCH ₃	
NO ₂	-	OCH ₃	
CN	-	OCH ₃	
CH ₃	-	OCH ₃	
OCH ₃	-	OCH ₃	
CF ₃	-	OCH ₃	
OCHF ₂	-	OCH ₃	
OCF ₃	-	OCH ₃	
SO ₂ CH ₃	-	OCH ₃	
H	(5-) Cl	CF ₃	CH ₃
F	(5-) Cl	CH ₃	CH ₃
Cl	(5-) Cl	OCH ₃	CH ₃
Br	(5-) Cl	Br	

R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
Cl	(5-) Cl	CF ₃	CH ₃
NO ₂	(5-) Cl	CH ₃	CH ₃
Cl	(5-) Cl	SCH ₃	CH ₃
CH ₃	(5-) Cl	Cl	CH ₃
OCH ₃	(5-) Cl	OCH ₃	CH ₃
CF ₃	(5-) Cl	CF ₃	CH ₃
OCHF ₂	(5-) Cl	CH ₃	CH ₃
OCF ₃	(5-) Cl	CH ₃	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(5-) Cl	OCH ₃	CH ₃

Gruppe 2

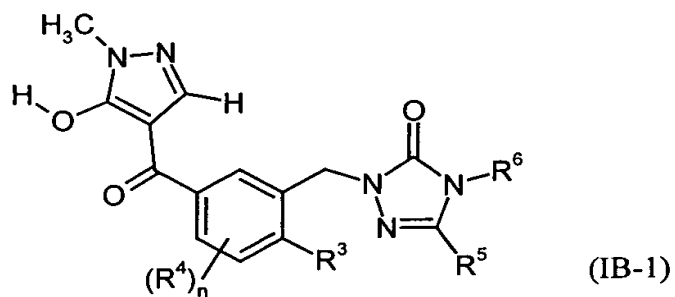
5

R³, (R⁴)_n, R⁵ und R⁶ haben hierbei beispielhaft die oben in Gruppe 1 angegebenen Bedeutungen.

Gruppe 3

5

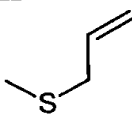
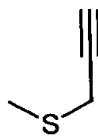
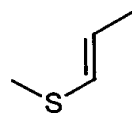
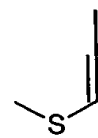
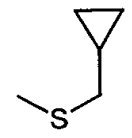
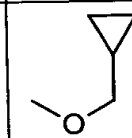
R^3 , $(R^4)_n$, R^5 und R^6 haben hierbei beispielhaft die oben in Gruppe 1 angegebenen Bedeutungen.



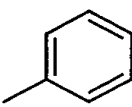
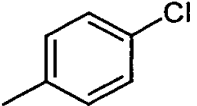
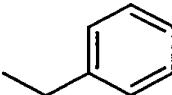
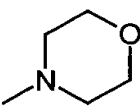
Gruppe 4

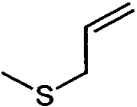

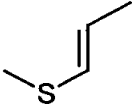
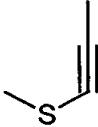
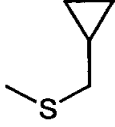
10

R^3 , $(R^4)_n$, R^5 und R^6 haben hierbei beispielhaft die in der nachstehenden Tabelle angegebenen Bedeutungen:

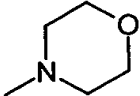
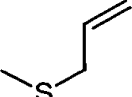
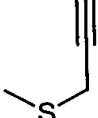
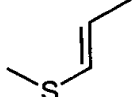
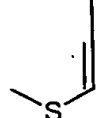
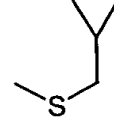
R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
Cl	(2-) Cl	CF ₃	CH ₃
Cl	(2-) Cl	SCH ₃	CH ₃
Cl	(2-) Cl	SC ₂ H ₅	CH ₃
Cl	(2-) Cl	SC ₃ H ₇	CH ₃

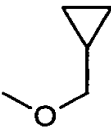


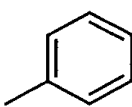
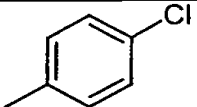
R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
Cl	(2-) Cl	SC_3H_7-i	CH_3
Cl	(2-) Cl		CH_3
Cl	(2-) Cl		CH_3
Cl	(2-) Cl		CH_3
Cl	(2-) Cl		CH_3
Cl	(2-) Cl		CH_3
Cl	(2-) Cl	$SCH=C=CH_2$	CH_3
Cl	(2-) Cl	SCH_2CN	CH_3
Cl	(2-) Cl	SCH_2CH_2CN	CH_3
Cl	(2-) Cl	OCH_3	CH_3
Cl	(2-) Cl	OC_2H_5	CH_3
Cl	(2-) Cl	OC_3H_7	CH_3
Cl	(2-) Cl	OC_3H_7-i	CH_3
Cl	(2-) Cl	OC_4H_9	CH_3
Cl	(2-) Cl	OCH_2CF_3	CH_3
Cl	(2-) Cl		CH_3

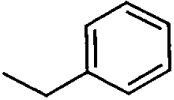
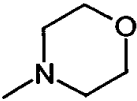
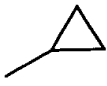
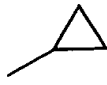
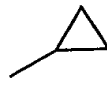
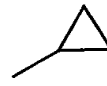
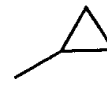
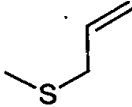
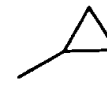
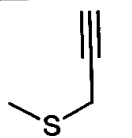
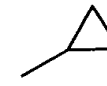
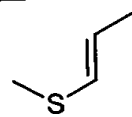
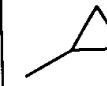
R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
Cl	(2-) Cl	OC ₆ H ₅	CH ₃
Cl	(2-) Cl	H	CH ₃
Cl	(2-) Cl	CH ₃	CH ₃
Cl	(2-) Cl	C ₂ H ₅	CH ₃
Cl	(2-) Cl	C ₃ H ₇	CH ₃
Cl	(2-) Cl	C ₃ H ₇ -i	CH ₃
Cl	(2-) Cl	C ₄ H ₉	CH ₃
Cl	(2-) Cl	C ₄ H ₉ -i	CH ₃
Cl	(2-) Cl	C ₄ H ₉ -s	CH ₃
Cl	(2-) Cl	C ₄ H ₉ -t	CH ₃
Cl	(2-) Cl		CH ₃
Cl	(2-) Cl		CH ₃
Cl	(2-) Cl	CH=CHCH ₃	CH ₃
Cl	(2-) Cl		CH ₃
Cl	(2-) Cl		CH ₃
Cl	(2-) Cl		CH ₃
Cl	(2-) Cl	N(CH ₃) ₂	CH ₃
Cl	(2-) Cl		CH ₃
Cl	(2-) Cl	Cl	CH ₃
Cl	(2-) Cl	Br	CH ₃

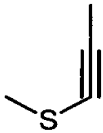
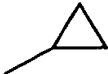
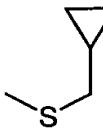


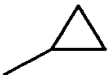



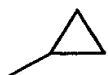
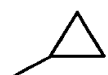

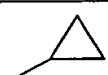
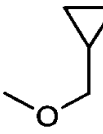

R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	CF ₃	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SCH ₃	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SC ₂ H ₅	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SC ₃ H ₇	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SC ₃ H ₇ -i	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SCH=C=CH ₂	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SCH ₂ CN	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SCH ₂ CH ₂ CN	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OCH ₃	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₂ H ₅	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₃ H ₇	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₃ H ₇ -i	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₄ H ₉	CH ₃

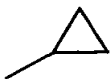
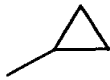
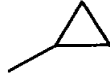
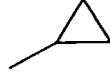
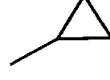
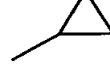

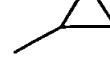



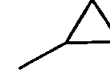
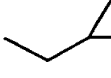


R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OCH ₂ CF ₃	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₆ H ₅	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	H	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	CH ₃	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₂ H ₅	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₃ H ₇	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₃ H ₇ -i	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₄ H ₉	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₄ H ₉ -i	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₄ H ₉ -s	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₄ H ₉ -t	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	CH=CHCH ₃	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	N(CH ₃) ₂	CH ₃

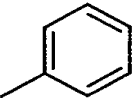
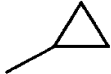
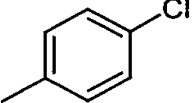
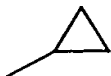
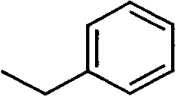

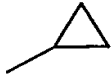
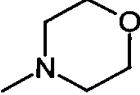
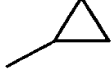
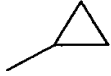
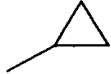

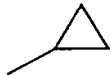
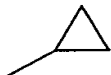
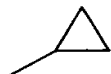

R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	Cl	CH ₃
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	Br	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	CF ₃	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	SCH ₃	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	SC ₂ H ₅	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	SC ₃ H ₇	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	SC ₃ H ₇ -i	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	SCH=C=CH ₂	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	SCH ₂ CN	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	SCH ₂ CH ₂ CN	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OCH ₃	CH ₃

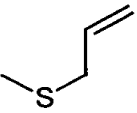
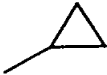
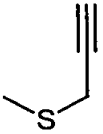

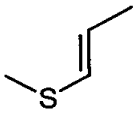
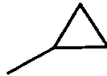
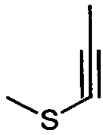
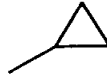
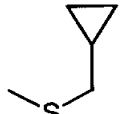


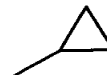
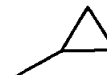
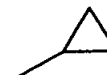

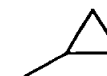
R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OC ₂ H ₅	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OC ₃ H ₇	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OC ₃ H ₇ -i	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OC ₄ H ₉	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OCH ₂ CF ₃	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OC ₆ H ₅	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	H	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	CH ₃	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₂ H ₅	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₃ H ₇	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₃ H ₇ -i	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₄ H ₉	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₄ H ₉ -i	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₄ H ₉ -s	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₄ H ₉ -t	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	CH=CHCH ₃	CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		CH ₃
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		CH ₃



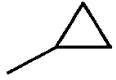
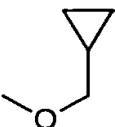
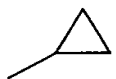

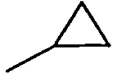

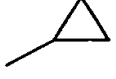
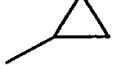
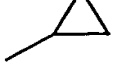
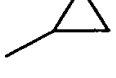
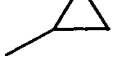
R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
Cl	(2-) SO_2CH_3		CH_3
Cl	(2-) SO_2CH_3	$\text{N}(\text{CH}_3)_2$	CH_3
Cl	(2-) SO_2CH_3		CH_3
Cl	(2-) SO_2CH_3	Cl	CH_3
Cl	(2-) SO_2CH_3	Br	CH_3
Cl	(2-) Cl	CF_3	
Cl	(2-) Cl	SCH_3	
Cl	(2-) Cl	SC_2H_5	
Cl	(2-) Cl	SC_3H_7	
Cl	(2-) Cl	$\text{SC}_3\text{H}_7\text{-i}$	
Cl	(2-) Cl		
Cl	(2-) Cl		
Cl	(2-) Cl		


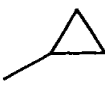
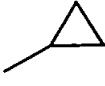
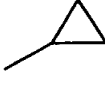
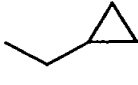
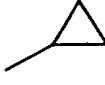

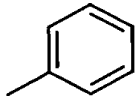
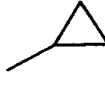
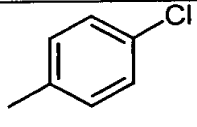

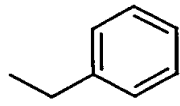
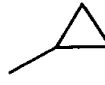

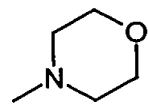
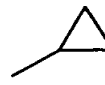
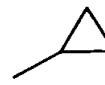
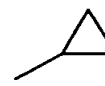
R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
Cl	(2-) Cl		
Cl	(2-) Cl		
Cl	(2-) Cl	$SCH=C=CH_2$	
Cl	(2-) Cl	SCH_2CN	
Cl	(2-) Cl	SCH_2CH_2CN	
Cl	(2-) Cl	OCH_3	
Cl	(2-) Cl	OC_2H_5	
Cl	(2-) Cl	OC_3H_7	
Cl	(2-) Cl	OC_3H_7-i	
Cl	(2-) Cl	OC_4H_9	
Cl	(2-) Cl	OCH_2CF_3	
Cl	(2-) Cl		


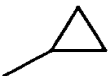

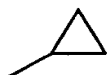

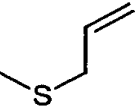
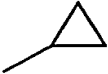
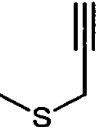
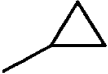
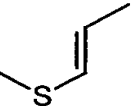
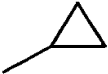
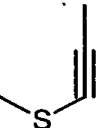
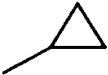
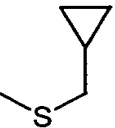


R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
Cl	(2-) Cl	OC_6H_5	
Cl	(2-) Cl	H	
Cl	(2-) Cl	CH_3	
Cl	(2-) Cl	C_2H_5	
Cl	(2-) Cl	C_3H_7	
Cl	(2-) Cl	C_3H_7-i	
Cl	(2-) Cl	C_4H_9	
Cl	(2-) Cl	C_4H_9-i	
Cl	(2-) Cl	C_4H_9-s	
Cl	(2-) Cl	C_4H_9-t	
Cl	(2-) Cl		
Cl	(2-) Cl		
Cl	(2-) Cl	$CH=CHCH_3$	

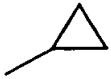
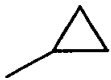

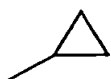


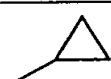
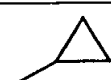
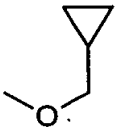
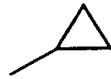

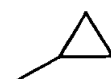
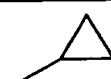
R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
Cl	(2-) Cl		
Cl	(2-) Cl		
Cl	(2-) Cl		
Cl	(2-) Cl	N(CH ₃) ₂	
Cl	(2-) Cl		
Cl	(2-) Cl	Cl	
Cl	(2-) Cl	Br	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	CF ₃	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SCH ₃	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SC ₂ H ₅	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SC ₃ H ₇	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SC ₃ H ₇ -i	






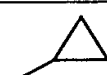
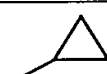

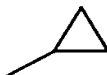
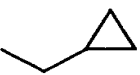


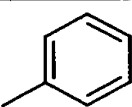

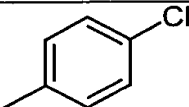

R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SCH=C=CH ₂	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SCH ₂ CN	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SCH ₂ CH ₂ CN	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OCH ₃	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₂ H ₅	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₃ H ₇	

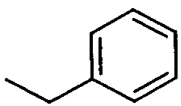
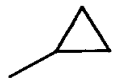

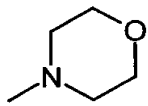
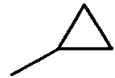
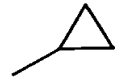
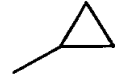
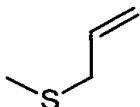
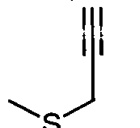
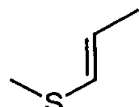
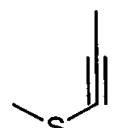
R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₃ H ₇ -i	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₄ H ₉	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OCH ₂ CF ₃	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₆ H ₅	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	H	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	CH ₃	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₂ H ₅	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₃ H ₇	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₃ H ₇ -i	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₄ H ₉	
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₄ H ₉ -i	

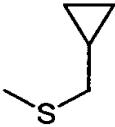
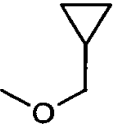

R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
SO_2CH_3	(2-) Cl	C_4H_9-s	
SO_2CH_3	(2-) Cl	C_4H_9-t	
SO_2CH_3	(2-) Cl		
SO_2CH_3	(2-) Cl		
SO_2CH_3	(2-) Cl	$CH=CHCH_3$	
SO_2CH_3	(2-) Cl		
SO_2CH_3	(2-) Cl		
SO_2CH_3	(2-) Cl		
SO_2CH_3	(2-) Cl	$N(CH_3)_2$	
SO_2CH_3	(2-) Cl		
SO_2CH_3	(2-) Cl	Cl	
SO_2CH_3	(2-) Cl	Br	

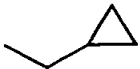
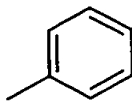
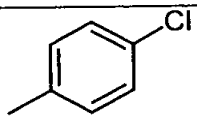
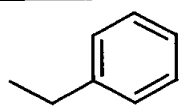
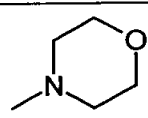
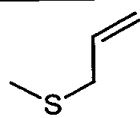
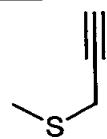
R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
Cl	(2-) SO_2CH_3	CF_3	
Cl	(2-) SO_2CH_3	SCH_3	
Cl	(2-) SO_2CH_3	SC_2H_5	
Cl	(2-) SO_2CH_3	SC_3H_7	
Cl	(2-) SO_2CH_3	$\text{SC}_3\text{H}_7\text{-i}$	
Cl	(2-) SO_2CH_3		
Cl	(2-) SO_2CH_3		
Cl	(2-) SO_2CH_3		
Cl	(2-) SO_2CH_3		
Cl	(2-) SO_2CH_3		
Cl	(2-) SO_2CH_3	$\text{SCH}=\text{C}=\text{CH}_2$	

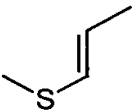
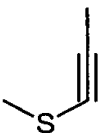
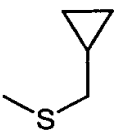
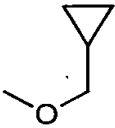
R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
Cl	(2-) SO_2CH_3	SCH_2CN	
Cl	(2-) SO_2CH_3	SCH_2CH_2CN	
Cl	(2-) SO_2CH_3	OCH_3	
Cl	(2-) SO_2CH_3	OC_2H_5	
Cl	(2-) SO_2CH_3	OC_3H_7	
Cl	(2-) SO_2CH_3	OC_3H_7-i	
Cl	(2-) SO_2CH_3	OC_4H_9	
Cl	(2-) SO_2CH_3	OCH_2CF_3	
Cl	(2-) SO_2CH_3		
Cl	(2-) SO_2CH_3	OC_6H_5	
Cl	(2-) SO_2CH_3	H	
Cl	(2-) SO_2CH_3	CH_3	


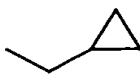
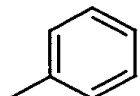
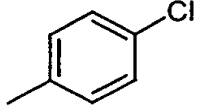
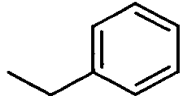
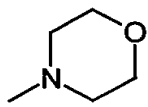
R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₂ H ₅	
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₃ H ₇	
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₃ H ₇ -i	
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₄ H ₉	
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₄ H ₉ -i	
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₄ H ₉ -s	
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	C ₄ H ₉ -t	
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	CH=CHCH ₃	
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		

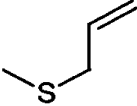
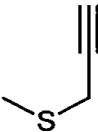
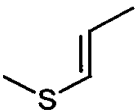
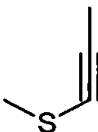
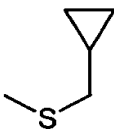
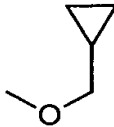
R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	N(CH ₃) ₂	
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	Cl	
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	Br	
Cl	(2-) Cl	CF ₃	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	SCH ₃	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	SC ₂ H ₅	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	SC ₃ H ₇	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	SC ₃ H ₇ -i	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂


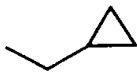
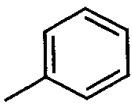
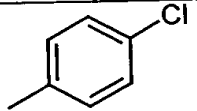
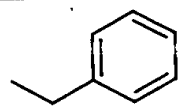
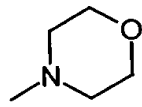
R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
Cl	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	SCH=C=CH ₂	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	SCH ₂ CN	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	SCH ₂ CH ₂ CN	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	OCH ₃	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	OC ₂ H ₅	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	OC ₃ H ₇	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	OC ₃ H ₇ -i	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	OC ₄ H ₉	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	OCH ₂ CF ₃	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	OC ₆ H ₅	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	H	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	CH ₃	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	C ₂ H ₅	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	C ₃ H ₇	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	C ₃ H ₇ -i	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	C ₄ H ₉	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	C ₄ H ₉ -i	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	C ₄ H ₉ -s	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	C ₄ H ₉ -t	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂

R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
Cl	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	CH=CHCH ₃	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	N(CH ₃) ₂	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	Cl	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) Cl	Br	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	CF ₃	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SCH ₃	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SC ₂ H ₅	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SC ₃ H ₇	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SC ₃ H _{7-i}	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂

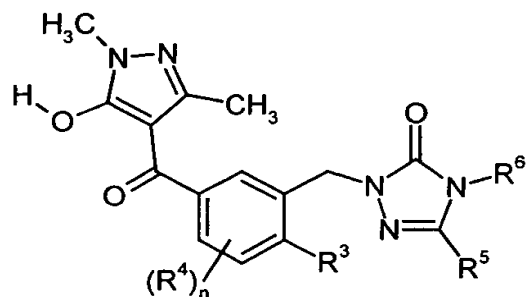
R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SCH=C=CH ₂	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SCH ₂ CN	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	SCH ₂ CH ₂ CN	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OCH ₃	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₂ H ₅	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₃ H ₇	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₃ H ₇ -i	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₄ H ₉	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OCH ₂ CF ₃	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl		N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	OC ₆ H ₅	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	H	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	CH ₃	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₂ H ₅	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₃ H ₇	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₃ H ₇ -i	N(CH ₃) ₂
SO ₂ CH ₃	(2-) Cl	C ₄ H ₉	N(CH ₃) ₂

R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
SO_2CH_3	(2-) Cl	C_4H_9-i	$N(CH_3)_2$
SO_2CH_3	(2-) Cl	C_4H_9-s	$N(CH_3)_2$
SO_2CH_3	(2-) Cl	C_4H_9-t	$N(CH_3)_2$
SO_2CH_3	(2-) Cl		$N(CH_3)_2$
SO_2CH_3	(2-) Cl		$N(CH_3)_2$
SO_2CH_3	(2-) Cl	$CH=CHCH_3$	$N(CH_3)_2$
SO_2CH_3	(2-) Cl		$N(CH_3)_2$
SO_2CH_3	(2-) Cl		$N(CH_3)_2$
SO_2CH_3	(2-) Cl		$N(CH_3)_2$
SO_2CH_3	(2-) Cl	$N(CH_3)_2$	$N(CH_3)_2$
SO_2CH_3	(2-) Cl		$N(CH_3)_2$
SO_2CH_3	(2-) Cl	Cl	$N(CH_3)_2$
SO_2CH_3	(2-) Cl	Br	$N(CH_3)_2$
Cl	(2-) SO_2CH_3	CF_3	$N(CH_3)_2$
Cl	(2-) SO_2CH_3	SCH_3	$N(CH_3)_2$
Cl	(2-) SO_2CH_3	SC_2H_5	$N(CH_3)_2$
Cl	(2-) SO_2CH_3	SC_3H_7	$N(CH_3)_2$
Cl	(2-) SO_2CH_3	SC_3H_7-i	$N(CH_3)_2$

R ³	(Position-) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	SCH=C=CH ₂	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	SCH ₂ CN	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	SCH ₂ CH ₂ CN	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OCH ₃	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OC ₂ H ₅	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OC ₃ H ₇	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OC ₃ H ₇ -i	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OC ₄ H ₉	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OCH ₂ CF ₃	N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃		N(CH ₃) ₂
Cl	(2-) SO ₂ CH ₃	OC ₆ H ₅	N(CH ₃) ₂

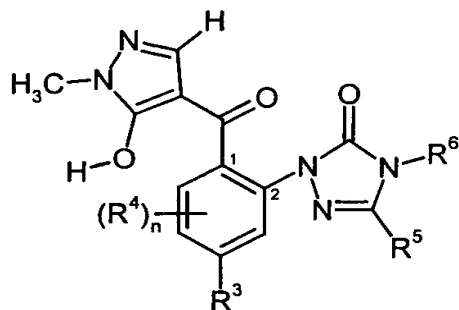
R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
Cl	(2-) SO_2CH_3	H	$\text{N}(\text{CH}_3)_2$
Cl	(2-) SO_2CH_3	CH_3	$\text{N}(\text{CH}_3)_2$
Cl	(2-) SO_2CH_3	C_2H_5	$\text{N}(\text{CH}_3)_2$
Cl	(2-) SO_2CH_3	C_3H_7	$\text{N}(\text{CH}_3)_2$
Cl	(2-) SO_2CH_3	$\text{C}_3\text{H}_7\text{-i}$	$\text{N}(\text{CH}_3)_2$
Cl	(2-) SO_2CH_3	C_4H_9	$\text{N}(\text{CH}_3)_2$
Cl	(2-) SO_2CH_3	$\text{C}_4\text{H}_9\text{-i}$	$\text{N}(\text{CH}_3)_2$
Cl	(2-) SO_2CH_3	$\text{C}_4\text{H}_9\text{-s}$	$\text{N}(\text{CH}_3)_2$
Cl	(2-) SO_2CH_3	$\text{C}_4\text{H}_9\text{-t}$	$\text{N}(\text{CH}_3)_2$
Cl	(2-) SO_2CH_3		$\text{N}(\text{CH}_3)_2$
Cl	(2-) SO_2CH_3		$\text{N}(\text{CH}_3)_2$
Cl	(2-) SO_2CH_3	$\text{CH}=\text{CHCH}_3$	$\text{N}(\text{CH}_3)_2$
Cl	(2-) SO_2CH_3		$\text{N}(\text{CH}_3)_2$
Cl	(2-) SO_2CH_3		$\text{N}(\text{CH}_3)_2$
Cl	(2-) SO_2CH_3		$\text{N}(\text{CH}_3)_2$
Cl	(2-) SO_2CH_3	$\text{N}(\text{CH}_3)_2$	$\text{N}(\text{CH}_3)_2$
Cl	(2-) SO_2CH_3		$\text{N}(\text{CH}_3)_2$
Cl	(2-) SO_2CH_3	Cl	$\text{N}(\text{CH}_3)_2$
Cl	(2-) SO_2CH_3	Br	$\text{N}(\text{CH}_3)_2$
Cl	(2-) Cl	CH_3	OCH_3

R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
Cl	(2-) Cl	C_2H_5	OCH_3
Cl	(2-) Cl	C_3H_7	OCH_3
Cl	(2-) Cl	SCH_3	OCH_3
Cl	(2-) Cl	SC_2H_5	OCH_3
Cl	(2-) Cl	OCH_3	OCH_3
Cl	(2-) Cl	OC_2H_5	OCH_3
Cl	(2-) Cl	CH_3	OC_2H_5
Cl	(2-) Cl	C_2H_5	OC_2H_5
Cl	(2-) Cl	C_3H_7	OC_2H_5
Cl	(2-) Cl	SCH_3	OC_2H_5
Cl	(2-) Cl	SC_2H_5	OC_2H_5
Cl	(2-) Cl	OCH_3	OC_2H_5
Cl	(2-) Cl	OC_2H_5	OC_2H_5
Cl	(2-) SO_2CH_3	CH_3	OCH_3
Cl	(2-) SO_2CH_3	C_2H_5	OCH_3
Cl	(2-) SO_2CH_3	C_3H_7	OCH_3
Cl	(2-) SO_2CH_3	SCH_3	OCH_3
Cl	(2-) SO_2CH_3	SC_2H_5	OCH_3
Cl	(2-) SO_2CH_3	OCH_3	OCH_3
Cl	(2-) SO_2CH_3	OC_2H_5	OCH_3
Cl	(2-) SO_2CH_3	CH_3	OC_2H_5
Cl	(2-) SO_2CH_3	C_2H_5	OC_2H_5
Cl	(2-) SO_2CH_3	C_3H_7	OC_2H_5
Cl	(2-) SO_2CH_3	SCH_3	OC_2H_5
Cl	(2-) SO_2CH_3	SC_2H_5	OC_2H_5
Cl	(2-) SO_2CH_3	OCH_3	OC_2H_5
Cl	(2-) SO_2CH_3	OC_2H_5	OC_2H_5
SO_2CH_3	(2-) Cl	Cl	OCH_3

Gruppe 6

(IB-3)

R^3 , $(R^4)_n$, R^5 und R^6 haben hierbei beispielhaft die oben in Gruppe 4 angegebenen Bedeutungen.

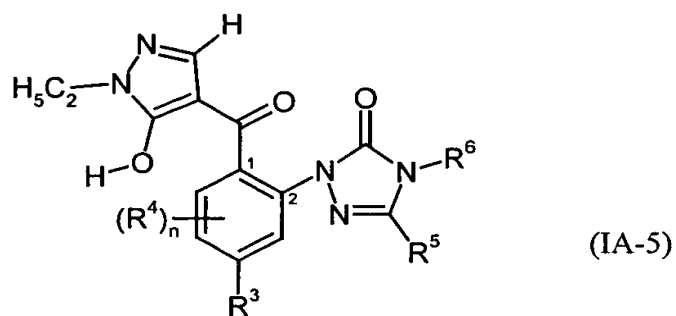
Gruppe 7

(IA-4)

R^3 , $(R^4)_n$, R^5 und R^6 haben hierbei beispielhaft die in der nachstehenden Tabelle angegebenen Bedeutungen:

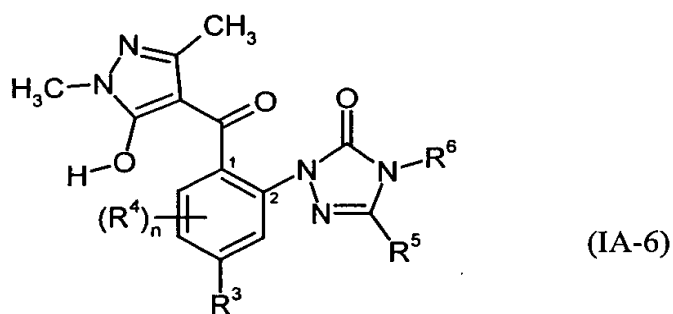
R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
H	-	CF_3	CH_3
F	-	CF_3	CH_3
Cl	-	CF_3	CH_3
Br	-	CF_3	CH_3

Gruppe 8



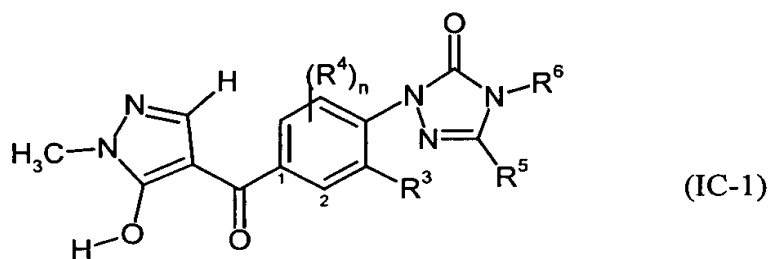
R^3 , $(R^4)_n$, R^5 und R^6 haben hierbei beispielhaft die oben in Gruppe 7 angegebenen Bedeutungen.

Gruppe 9



R^3 , $(R^4)_n$, R^5 und R^6 haben hierbei beispielhaft die oben in Gruppe 7 angegebenen Bedeutungen.

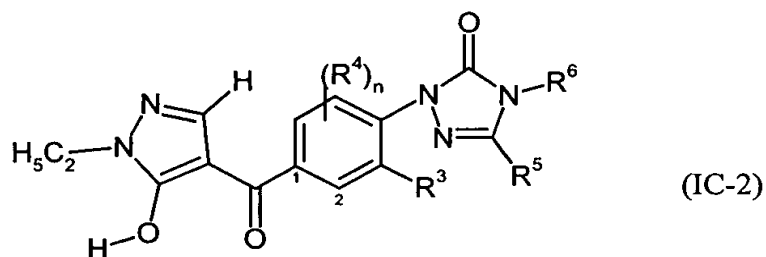
Gruppe 10



R^3 , $(R^4)_n$, R^5 und R^6 haben hierbei beispielhaft die in der nachstehenden Tabelle angegebenen Bedeutungen:

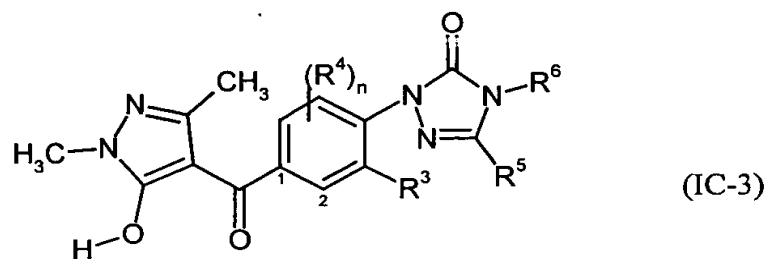
R^3	(Position-) $(R^4)_n$	R^5	R^6
H	(2-) F	CF_3	CH_3
H	(2-) Cl	CF_3	CH_3
H	(2-) Br	CF_3	CH_3
H	-	CF_3	CH_3

Gruppe 11



R^3 , $(R^4)_n$, R^5 und R^6 haben hierbei beispielhaft die oben in Gruppe 10 angegebenen Bedeutungen.

Gruppe 12

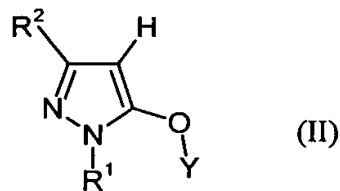


R^3 , $(R^4)_n$, R^5 und R^6 haben hierbei beispielhaft die oben in Gruppe 10 angegebenen Bedeutungen.

Die neuen substituierten Benzoylpyrazole der allgemeinen Formel (I) zeichnen sich durch starke und selektive herbizide Wirksamkeit aus.

5 Man erhält die neuen substituierten Benzoylpyrazole der allgemeinen Formel (I), wenn man

(a) Pyrazole der allgemeinen Formel (II)

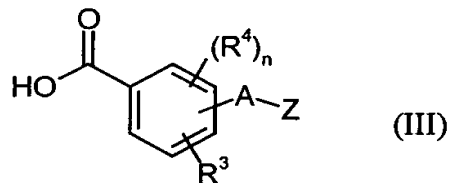


in welcher

10

R^1 , R^2 und Y die oben angegebene Bedeutung haben,

mit substituierten Benzoesäuren der allgemeinen Formel (III),



in welcher

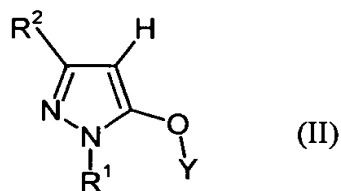
15

n , A, R^3 , R^4 und Z die oben angegebene Bedeutung haben,

20 in Gegenwart eines Dehydratisierungsmittels, gegebenenfalls in Gegenwart eines oder mehrerer Reaktionshilfsmittel und gegebenenfalls in Gegenwart eines Verdünnungsmittels umsetzt,

oder wenn man

(b) Pyrazole der allgemeinen Formel (II)

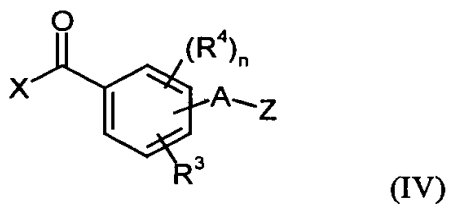


5 in welcher

R^1 , R^2 und Y die oben angegebene Bedeutung haben,

mit substituierten Benzoessäurederivaten der allgemeinen Formel (IV)

10



in welcher

n, A, R^3 , R^4 und Z die oben angegebene Bedeutung haben, und

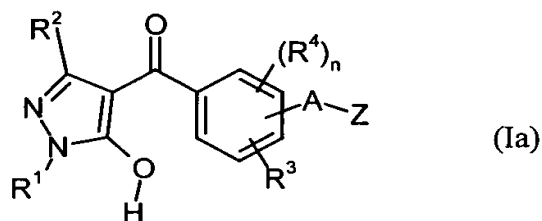
X für Cyano, Halogen oder Alkoxy steht,

- oder mit entsprechenden Carbonsäureanhydriden -

20 gegebenenfalls in Gegenwart eines oder mehrerer Reaktionshilfsmittel und gegebenenfalls in Gegenwart eines Verdünnungsmittels umgesetzt,

oder wenn man

(c) substituierte Benzoylpyrazole der allgemeinen Formel (Ia)



in welcher

5

n, A, R¹, R², R³, R⁴ und Z die oben angegebene Bedeutung haben,

mit Verbindungen der allgemeinen Formel (V)

10



in welcher

Y mit Ausnahme von Wasserstoff die oben angegebene Bedeutung hat,

15

- oder gegebenenfalls mit entsprechenden Isocyanaten oder Isothiocyanaten -

gegebenenfalls in Gegenwart eines oder mehrerer Reaktionshilfsmittel und gegebenenfalls in Gegenwart eines Verdünnungsmittels umgesetzt,

20

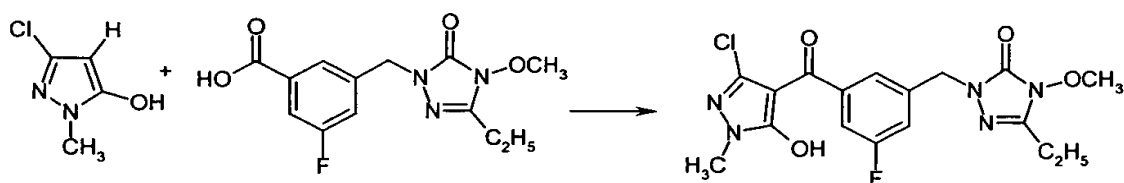
und gegebenenfalls im Anschluß daran an den so erhaltenen Verbindungen der Formel (I) im Rahmen der Substituentendefinition auf übliche Weise elektrophile oder nucleophile bzw. Oxidations- oder Reduktionsreaktionen durchführt oder die Verbindungen der Formel (I) auf übliche Weise in Salze überführt.

25

Die Verbindungen der Formel (I) können nach üblichen Methoden in andere Verbindungen der Formel (I) gemäß obiger Definition umgewandelt werden, beispielsweise

weise durch nucleophile Substitution (z.B. R^5 : $\text{Cl} \rightarrow \text{OC}_2\text{H}_5$, SCH_3) oder durch Oxidation (z.B. R^5 : $\text{CH}_2\text{SCH}_3 \rightarrow \text{CH}_2\text{S(O)CH}_3$).

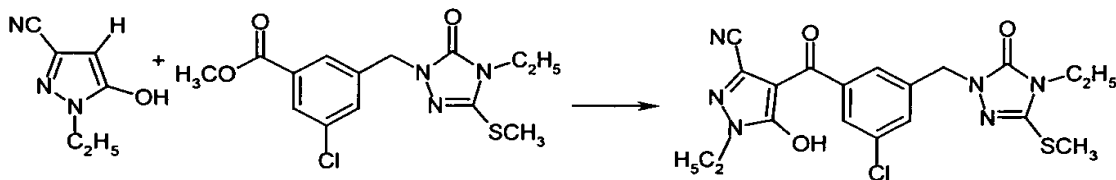
5 Verwendet man beispielsweise 3-Chlor-5-hydroxy-1-methyl-pyrazol und 2-(3-Carboxy-5-fluor-benzyl)-5-ethyl-4-methoxy-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on als Ausgangsstoffe, so kann der Reaktionsablauf beim erfindungsgemäßen Verfahren (a) durch das folgende Formelschema skizziert werden:



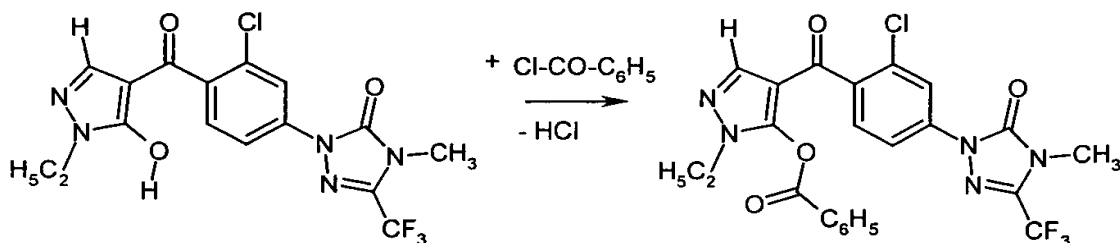
10

Verwendet man beispielsweise 3-Cyano-5-hydroxy-1-ethyl-pyrazol und 2-(3-Methoxycarbonyl-5-chlor-benzyl)-4-ethyl-5-methylthio-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on als Ausgangsstoffe, so kann der Reaktionsablauf beim erfindungsgemäßen Verfahren (b) durch das folgende Formelschema skizziert werden:

15



20 Verwendet man beispielsweise 4-Methyl-5-trifluormethyl-2-[3-chlor-4-(1-ethyl-5-hydroxy-pyrazol-4-yl-carbonyl)-phenyl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on und Benzoylchlorid als Ausgangsstoffe, so kann der Reaktionsablauf beim erfindungsgemäßen Verfahren (c) durch das folgende Formelschema skizziert werden:



Die beim erfindungsgemäßen Verfahren (a) zur Herstellung von Verbindungen der allgemeinen Formel (I) als Ausgangsstoffe zu verwendenden Pyrazole sind durch die Formel (II) allgemein definiert. In der allgemeinen Formel (II) haben R¹, R² und Y vorzugsweise diejenigen Bedeutungen, die bereits oben im Zusammenhang mit der Beschreibung der erfindungsgemäßen Verbindungen der allgemeinen Formel (I) als bevorzugt, besonders bevorzugt, ganz besonders bevorzugt oder am meisten bevorzugt für R¹, R² und Y angegeben worden sind.

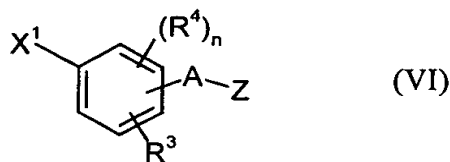
Die Ausgangsstoffe der allgemeinen Formel (II) sind bekannt und/oder können nach an sich bekannten Verfahren hergestellt werden (vgl. EP-A-240001).

Die beim erfindungsgemäßen Verfahren (a) weiter als Ausgangsstoffe zu verwendenden substituierten Benzoesäuren sind durch die Formel (III) allgemein definiert. In der Formel (III) haben n, A, R³, R⁴ und Z vorzugsweise diejenigen Bedeutungen, die bereits oben im Zusammenhang mit der Beschreibung der erfindungsgemäßen Verbindungen der Formel (I) als bevorzugt, besonders bevorzugt, ganz besonders bevorzugt oder am meisten bevorzugt für n, A, R³, R⁴ und Z angegeben wurden.

Die Ausgangsstoffe der allgemeinen Formel (III) sind mit Ausnahme von 2-(5-Carboxy-2,4-dichlor-phenyl)-4-difluormethyl-5-methyl-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on - alias 2,4-Dichlor-5-(4-difluormethyl-4,5-dihydro-3-methyl-5-oxo-1H-1,2,4-triazol-1-yl)-benzoesäure (CAS-Reg.-Nr. 90208-77-8) und 2-(5-Carboxy-2,4-dichlor-phenyl)-4,5-dimethyl-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on - alias 2,4-Dichlor-

5-(4,5-dihydro-3,4-dimethyl-5-oxo-1H-1,2,4-triazol-1-yl)-benzoesäure (CAS-Reg.-Nr. 90208-76-7) - noch nicht aus der Literatur bekannt. Sie sind jedoch unter Ausnahme von 2-(5-Carboxy-2,4-dichlor-phenyl)-4-difluormethyl-5-methyl-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on und 2-(5-Carboxy-2,4-dichlor-phenyl)-4,5-dimethyl-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on (vgl. JP-A-58225070 - zitiert in Chem. Abstracts 100:209881, JP-A-02015069 - zitiert in Chem. Abstracts 113:23929) Gegenstand einer vorgängigen, jedoch nicht vorveröffentlichten Anmeldung (vgl. DE-A-19833360).

Man erhält die substituierten Benzoesäuren der allgemeinen Formel (III), wenn man Benzoesäurederivate der allgemeinen Formel (VI),



in welcher

n, A, R³ und R⁴ und Z die oben angegebene Bedeutung haben, und

X¹ für Cyano, Carbamoyl, Halogencarbonyl oder Alkoxycarbonyl steht,

mit Wasser, gegebenenfalls in Gegenwart eines Hydrolysehilfsmittels, wie z.B. Schwefelsäure, bei Temperaturen zwischen 50°C und 120°C umgesetzt (vgl. die Herstellungsbeispiele).

Die beim erfindungsgemäßen Verfahren (b) zur Herstellung von Verbindungen der allgemeinen Formel (I) als Ausgangsstoffe zu verwendenden substituierten Benzoesäurederivate sind durch die Formel (IV) allgemein definiert. In der allgemeinen Formel (IV) haben n, A, R³, R⁴ und Z vorzugsweise diejenigen Bedeutungen, die bereits oben im Zusammenhang mit der Beschreibung der erfindungsgemäßen Ver-

bindungen der allgemeinen Formel (I) als bevorzugt, besonders bevorzugt, ganz besonders bevorzugt oder am meisten bevorzugt für n, A, R³, R⁴ und Z angegeben worden sind; X steht vorzugsweise für Cyano, Fluor, Chlor, Brom oder C₁-C₄-Alkoxy, insbesondere für Chlor, Methoxy oder Ethoxy.

5

Die Ausgangsstoffe der allgemeinen Formel (IV) – sowie die Vorprodukte der allgemeinen Formel (VI) – sind bekannt und/oder können nach an sich bekannten Verfahren hergestellt werden (vgl. DE-A-3839480, DE-A-4239296, EP-A-597360, EP-A-609734, DE-A-4303676, EP-A-617026, DE-A-4405614, US-A-5378681).

10

Die beim erfindungsgemäßen Verfahren (c) zur Herstellung von Verbindungen der allgemeinen Formel (I) als Ausgangsstoffe zu verwendenden substituierten Benzoylpyrazole sind durch die Formel (Ia) allgemein definiert. In der allgemeinen Formel (Ia) haben n, A, R¹, R², R³, R⁴ und Z vorzugsweise diejenigen Bedeutungen, die bereits oben im Zusammenhang mit der Beschreibung der erfindungsgemäßen Verbindungen der allgemeinen Formel (I) als bevorzugt, besonders bevorzugt, ganz besonders bevorzugt oder am meisten bevorzugt für n, A, R¹, R², R³, R⁴ und Z angegeben worden sind.

15

20

Die Ausgangsstoffe der allgemeinen Formel (Ia) sind erfindungsgemäße, neue Verbindungen; sie können nach den erfindungsgemäßen Verfahren (a) und (b) hergestellt werden.

25

Die beim erfindungsgemäßen (c) weiter als Ausgangsstoffe zu verwendenden Verbindungen sind durch die Formel (V) allgemein definiert. In der allgemeinen Formel (V) hat Y vorzugsweise diejenige Bedeutung, die bereits oben im Zusammenhang mit der Beschreibung der erfindungsgemäßen Verbindungen der allgemeinen Formel (I) als bevorzugt, besonders bevorzugt, ganz besonders bevorzugt oder am meisten bevorzugt für Y angegeben worden ist.

30

Die Ausgangsstoffe der allgemeinen Formel (V) sind bekannte Syntheschemikalien.

Das erfindungsgemäße Verfahren (a) zur Herstellung der neuen substituierten Benzoylpyrazole der allgemeinen Formel (I) wird unter Verwendung eines Dehydratisierungsmittels durchgeführt. Es kommen hierbei die üblichen zur Bindung von Wasser geeigneten Chemikalien in Betracht.

Als Beispiele hierfür seien Dicyclohexylcarbodiimid und Carbonyl-bis-imidazol genannt.

Als besonders gut geeignetes Dehydratisierungsmittel sei Dicyclohexylcarbodiimid genannt.

Das erfindungsgemäße Verfahren (a) zur Herstellung der neuen substituierten Benzoylpyrazole der allgemeinen Formel (I) wird gegebenenfalls unter Verwendung eines Reaktionshilfsmittels durchgeführt.

Als Beispiele hierfür seien Natriumcyanid, Kaliumcyanid, Acetoncyanhydrin, 2-Cyano-2-(trimethylsilyloxy)-propan und Trimethylsilylcyanid genannt.

Als besonders gut geeignetes Reaktionshilfsmittel sei Trimethylsilylcyanid genannt.

Das erfindungsgemäße Verfahren (b) zur Herstellung der neuen substituierten Benzoylpyrazole der allgemeinen Formel (I) wird gegebenenfalls unter Verwendung von Reaktionshilfsmitteln durchgeführt.

Als Beispiele hierfür seien (konz.) Schwefelsäure, Zinkchlorid, Aluminiumchlorid, und Borfluorid genannt.

Die erfindungsgemäßen Verfahren zur Herstellung der neuen substituierten Benzoylpyrazole der allgemeinen Formel (I) werden gegebenenfalls unter Verwendung weiterer Reaktionshilfsmittel durchgeführt. Als (weitere) Reaktionshilfsmittel für die

erfindungsgemäßen Verfahren kommen im allgemeinen basische organische Stickstoffverbindungen, wie beispielsweise Trimethylamin, Triethylamin, Tripropylamin, Tributylamin, Ethyl-diisopropylamin, N,N-Dimethyl-cyclohexylamin, Dicyclohexylamin, Ethyl-dicyclohexylamin, N,N-Dimethyl-anilin, N,N-Dimethyl-benzylamin, Pyridin, 2-Methyl-, 3-Methyl-, 4-Methyl-, 2,4-Dimethyl-, 2,6-Dimethyl-, 3,4-Dimethyl- und 3,5-Dimethyl-pyridin, 5-Ethyl-2-methyl-pyridin, 4-Dimethylaminopyridin, N-Methyl-piperidin, 1,4-Diazabicyclo[2,2,2]-octan (DABCO), 1,5-Diazabicyclo[4,3,0]-non-5-en (DBN), oder 1,8-Diazabicyclo[5,4,0]-undec-7-en (DBU) in Betracht.

Als Verdünnungsmittel zur Durchführung der erfindungsgemäßen Verfahren (a), (b) und (c) kommen vor allem inerte organische Lösungsmittel in Betracht. Hierzu gehören insbesondere aliphatische, alicyclische oder aromatische, gegebenenfalls halogenierte Kohlenwasserstoffe, wie beispielsweise Benzin, Benzol, Toluol, Xylol, Chlorbenzol, Dichlorbenzol, Petrolether, Hexan, Cyclohexan, Dichlormethan, Chloroform, Tetrachlormethan oder 1,2-Dichlor-ethan; Ether, wie Diethylether, Diisopropylether, Dioxan, Tetrahydrofuran, Ethylenglykoldimethyl- oder -diethylether; Ketone, wie Aceton, Butanon oder Methyl-isobutyl-keton; Nitrile, wie Acetonitril, Propionitril oder Butyronitril; Amide, wie N,N-Dimethylformamid, N,N-Dimethylacetamid, N-Methyl-formanilid, N-Methyl-pyrrolidon oder Hexamethylphosphorsäuretriamid; Ester wie Essigsäuremethylester oder Essigsäureethylester, Sulfoxide, wie Dimethylsulfoxid.

Die Reaktionstemperaturen können bei der Durchführung der erfindungsgemäßen Verfahren (a), (b) und (c) in einem größeren Bereich variiert werden. Im allgemeinen arbeitet man bei Temperaturen zwischen 0°C und 150°C, vorzugsweise zwischen 10°C und 120°C.

Die erfindungsgemäßen Verfahren (a), (b) und (c) werden im allgemeinen unter Normaldruck durchgeführt. Es ist jedoch auch möglich, die erfindungsgemäßen Ver-

fahren unter erhöhtem oder vermindertem Druck - im allgemeinen zwischen 0,1 bar und 10 bar - durchzuführen.

5 Zur Durchführung der erfindungsgemäßen Verfahren (a), (b) und (c) werden die Ausgangsstoffe im allgemeinen in angenähert äquimolaren Mengen eingesetzt. Es ist jedoch auch möglich, eine der Komponenten in einem größeren Überschuß zu verwenden. Die Umsetzung wird im allgemeinen in einem geeigneten Verdünnungsmittel in Gegenwart eines Dehydratisierungsmittels durchgeführt und das Reaktionsgemisch wird im allgemeinen mehrere Stunden bei der erforderlichen Temperatur gerührt. Die Aufarbeitung wird nach üblichen Methoden durchgeführt (vgl. die Herstellungsbeispiele).

10 Die erfindungsgemäßen Wirkstoffe können als Defoliantes, Desiccants, Krautabtötungsmittel und insbesondere als Unkrautvernichtungsmittel verwendet werden. Unter Unkraut im weitesten Sinne sind alle Pflanzen zu verstehen, die an Orten aufwachsen, wo sie unerwünscht sind. Ob die erfindungsgemäßen Stoffe als totale oder selektive Herbizide wirken, hängt im wesentlichen von der angewendeten Menge ab.

20 Die erfindungsgemäßen Wirkstoffe können z.B. bei den folgenden Pflanzen verwendet werden:

25 Dikotyle Unkräuter der Gattungen: Sinapis, Lepidium, Galium, Stellaria, Matricaria, Anthemis, Galinsoga, Chenopodium, Urtica, Senecio, Amaranthus, Portulaca, Xanthium, Convolvulus, Ipomoea, Polygonum, Sesbania, Ambrosia, Cirsium, Carduus, Sonchus, Solanum, Rorippa, Rotala, Lindernia, Lamium, Veronica, Abutilon, Emex, Datura, Viola, Galeopsis, Papaver, Centaurea, Trifolium, Ranunculus, Taraxacum.

30 Dikotyle Kulturen der Gattungen: Gossypium, Glycine, Beta, Daucus, Phaseolus, Pisum, Solanum, Linum, Ipomoea, Vicia, Nicotiana, Lycopersicon, Arachis, Brassica, Lactuca, Cucumis, Cucurbita.

Monokotyle Unkräuter der Gattungen: Echinochloa, Setaria, Panicum, Digitaria, Phleum, Poa, Festuca, Eleusine, Brachiaria, Lolium, Bromus, Avena, Cyperus, Sorghum, Agropyron, Cynodon, Monochoria, Fimbristylis, Sagittaria, Eleocharis, Scirpus, Paspalum, Ischaemum, Sphenoclea, Dactyloctenium, Agrostis, Alopecurus, Apera, Aegilops, Phalaris.

Monokotyle Kulturen der Gattungen: Oryza, Zea, Triticum, Hordeum, Avena, Secale, Sorghum, Panicum, Saccharum, Ananas, Asparagus, Allium.

10

Die Verwendung der erfindungsgemäßen Wirkstoffe ist jedoch keineswegs auf diese Gattungen beschränkt, sondern erstreckt sich in gleicher Weise auch auf andere Pflanzen.

15

Die erfindungsgemäßen Wirkstoffe eignen sich in Abhängigkeit von der Konzentration zur Totalunkrautbekämpfung, z.B. auf Industrie- und Gleisanlagen und auf Wegen und Plätzen mit und ohne Baumbewuchs. Ebenso können die erfindungsgemäßen Wirkstoffe zur Unkrautbekämpfung in Dauerkulturen, z.B. Forst, Ziergehölz-, Obst-, Wein-, Citrus-, Nuß-, Bananen-, Kaffee-, Tee-, Gummi-, Ölpalm-, Kakao-, Beerenfrucht- und Hopfenanlagen, auf Zier- und Sportrasen und Weideflächen sowie zur selektiven Unkrautbekämpfung in einjährigen Kulturen eingesetzt werden.

20

25

Die erfindungsgemäßen Verbindungen der Formel (I) zeigen starke herbizide Wirksamkeit und ein breites Wirkungsspektrum bei Anwendung auf dem Boden und auf oberirdische Pflanzenteile. Sie eignen sich in gewissem Umfang auch zur selektiven Bekämpfung von monokotylen und dikotylen Unkräutern in monokotylen und dikotylen Kulturen, sowohl im Vorauf- als auch im Nachauf-Verfahren.

30

Die Wirkstoffe können in die üblichen Formulierungen übergeführt werden, wie Lösungen, Emulsionen, Spritzpulver, Suspensionen, Pulver, Stäubemittel, Pasten,

lösliche Pulver, Granulate, Suspensions-Emulsions-Konzentrate, Wirkstoff-imprägnierte Natur- und synthetische Stoffe sowie Feinstverkapselungen in polymeren Stoffen.

- 5 Diese Formulierungen werden in bekannter Weise hergestellt, z. B. durch Vermischen der Wirkstoffe mit Streckmitteln, also flüssigen Lösungsmitteln und/oder festen Trägerstoffen, gegebenenfalls unter Verwendung von oberflächenaktiven Mitteln, also Emulgiermitteln und/oder Dispergiermitteln und/oder schaum-erzeugenden Mitteln.

10

Im Falle der Benutzung von Wasser als Streckmittel können z.B. auch organische Lösungsmittel als Hilfslösungsmittel verwendet werden. Als flüssige Lösungsmittel kommen im wesentlichen in Frage: Aromaten, wie Xylol, Toluol, oder Alkyl-naphthaline, chlorierte Aromaten und chlorierte aliphatische Kohlenwasserstoffe, wie Chlorbenzole, Chlorethylene oder Methylenchlorid, aliphatische Kohlenwasserstoffe, wie Cyclohexan oder Paraffine, z.B. Erdölfractionen, mineralische und pflanzliche Öle, Alkohole, wie Butanol oder Glykol sowie deren Ether und Ester, Ketone wie Aceton, Methylethylketon, Methylisobutylketon oder Cyclohexanon, stark polare Lösungsmittel, wie Dimethylformamid und Dimethylsulfoxid, sowie Wasser.

20

- Als feste Trägerstoffe kommen in Frage: z.B. Ammoniumsalze und natürliche Gesteinsmehle, wie Kaoline, Tonerden, Talkum, Kreide, Quarz, Attapulgit, Montmorillonit oder Diatomeenerde und synthetische Gesteinsmehle, wie hochdisperse Kieselsäure, Aluminiumoxid und Silikate, als feste Trägerstoffe für Granulate kommen in Frage: z.B. gebrochene und fraktionierte natürliche Gesteine wie Calcit, Marmor, Bims, Sepiolith, Dolomit sowie synthetische Granulate aus anorganischen und organischen Mehlen sowie Granulate aus organischem Material wie Sägemehl, Kokosnußschalen, Maiskolben und Tabakstengeln; als Emulgier- und/oder schaum-erzeugende Mittel kommen in Frage: z.B. nichtionogene und anionische Emulgatoren, wie Polyoxyethylen-Fettsäure-Ester, Polyoxyethylen-Fettalkohol-Ether, z.B. Alkylarylpolglykolether, Alkylsulfonate, Alkylsulfate, Arylsulfonate

30

sowie Eiweißhydrolysate; als Dispergiermittel kommen in Frage: z.B. Lignin-Sulfit-ablaugen und Methylcellulose.

5 Es können in den Formulierungen Haftmittel wie Carboxymethylcellulose, natürliche und synthetische pulvrige, körnige oder latexförmige Polymere verwendet werden, wie Gummiarabicum, Polyvinylalkohol, Polyvinylacetat, sowie natürliche Phospholipide, wie Kepheline und Lecithine und synthetische Phospholipide. Weitere Additive können mineralische und vegetabile Öle sein.

10 Es können Farbstoffe wie anorganische Pigmente, z.B. Eisenoxid, Titanoxid, Ferrocyanblau und organische Farbstoffe, wie Alizarin-, Azo- und Metallphthalocyanin-farbstoffe und Spurennährstoffe wie Salze von Eisen, Mangan, Bor, Kupfer, Kobalt, Molybdän und Zink verwendet werden.

15 Die Formulierungen enthalten im allgemeinen zwischen 0,1 und 95 Gewichtsprozent Wirkstoff, vorzugsweise zwischen 0,5 und 90 %.

20 Die erfindungsgemäßen Wirkstoffe können als solche oder in ihren Formulierungen auch in Mischung mit bekannten Herbiziden zur Unkrautbekämpfung Verwendung finden, wobei Fertigformulierungen oder Tankmischungen möglich sind.

Für die Mischungen kommen bekannte Herbizide infrage, beispielsweise

25 Acetochlor, Acifluorfen(-sodium), Aclonifen, Alachlor, Alloxydim(-sodium), Ametryne, Amidochlor, Amidosulfuron, Anilofos, Asulam, Atrazine, Azafenidin, Azimsulfuron, Benazolin(-ethyl), Benfuresate, Bensulfuron(-methyl), Bentazon, Benzofenap, Benzoylprop(-ethyl), Bialaphos, Bifenox, Bispyribac(-sodium), Bromo-butide, Bromofenoxim, Bromoxynil, Butachlor, Butroxydim, Butylate, Cafenstrole, Caloxydim, Carbetamide, Carfentrazone(-ethyl), Chlomethoxyfen, Chloramben,
30 Chloridazon, Chlorimuron(-ethyl), Chlornitrofen, Chlorsulfuron, Chlortoluron, Cini-don(-ethyl), Cinmethylin, Cinosulfuron, Clethodim, Clodinafop(-propargyl),

Clomazone, Clomeprop, Clopyralid, Clopyrasulfuron(-methyl), Cloransulam(-methyl), Cumyluron, Cyanazine, Cybutryne, Cycloate, Cyclosulfamuron, Cycloxydim, Cyhalofop(-butyl), 2,4-D, 2,4-DB, 2,4-DP, Desmedipham, Diallate, Dicamba, Diclofop(-methyl), Diclosulam, Diethatyl(-ethyl), Difenzoquat, Diflufenican, Diflufenzopyr, Dimefuron, Dimepiperate, Dimethachlor, Dimethametryn, Dimethenamid, Dimexyflam, Dinitramine, Diphenamid, Diquat, Dithiopyr, Diuron, Dymron, Eppropan, EPTC, Esprocarb, Ethalfluralin, Ethametsulfuron(-methyl), Ethofumesate, Ethoxyfen, Ethoxysulfuron, Etobenzanid, Fenoxaprop(-P-ethyl), Flamprop(-isopropyl), Flamprop(-isopropyl-L), Flamprop(-methyl), Flazasulfuron, Fluazifop(-P-butyl), Fluazolate, Flucarbazone, Flufenacet, Flumetsulam, Flumiclorac(-pentyl), Flumioxazin, Flumipropyn, Flumetsulam, Fluometuron, Fluorochloridone, Fluoroglycofen(-ethyl), Flupoxam, Flupropacil, Flurpyrsulfuron(-methyl, -sodium), Flurenol(-butyl), Fluridone, Fluroxypyr(-methyl), Flurprimidol, Flurtamone, Fluthiacet(-methyl), Fluthiamide, Fomesafen, Glufosinate(-ammonium), Glyphosate(-isopropylammonium), Halosafen, Haloxypyr(-ethoxyethyl), Haloxypyr(-P-methyl), Hexazinone, Imazamethabenz(-methyl), Imazamethapyr, Imazamox, Imazapic, Imazapyr, Imazaquin, Imazethapyr, Imazosulfuron, Iodosulfuron, Ioxynil, Isopropalin, Isoproturon, Isouron, Isoxaben, Isoxachlortole, Isoxaflutole, Isoxapyrifop, Lactofen, Lenacil, Linuron, MCPA, MCPP, Mefenacet, Mesotrione, Metamitron, Metazachlor, Methabenzthiazuron, Metobenzuron, Metobromuron, (alpha-)Metolachlor, Metosulam, Metoxuron, Metribuzin, Metsulfuron(-methyl), Molinate, Monolinuron, Naproanilide, Napropamide, Neburon, Nicosulfuron, Norflurazon, Orben carb, Oryzalin, Oxadiargyl, Oxadiazon, Oxasulfuron, Oxaziclomefone, Oxyfluorfen, Paraquat, Pelargonsäure, Pendimethalin, Pentoxazone, Phenmedipham, Piperophos, Pretilachlor, Primisulfuron(-methyl), Prometryn, Propachlor, Propanil, Propaquizafop, Propisochlor, Propyzamide, Prosulfocarb, Prosulfuron, Pyraflufen(-ethyl), Pyrazolate, Pyrazosulfuron(-ethyl), Pyrazoxyfen, Pyribenzoxim, Pyributicarb, Pyridate, Pyriminobac(-methyl), Pyriithiobac(-sodium), Quinchlorac, Quinmerac, Quinoclamine, Quizalofop(-P-ethyl), Quizalofop(-P-tefuryl), Rimsulfuron, Sethoxydim, Simazine, Simetryn, Sulcotrione, Sulfentrazone, Sulfometuron(-methyl), Sulfosate, Sulfosulfuron, Tebutam, Tebuthiuron, Tepraloxym, Terbutylazine, Ter

butryn, Thenylchlor, Thiafluamide, Thiazopyr, Thidiazimin, Thifensulfuron(-methyl), Thiobencarb, Tiocarbazil, Tralkoxydim, Triallate, Triasulfuron, Tribenuron(-methyl), Triclopyr, Tridiphane, Trifluralin und Triflusulfuron.

5 Auch eine Mischung mit anderen bekannten Wirkstoffen, wie Fungiziden, Insektiziden, Akariziden, Nematiziden, Schutzstoffen gegen Vogelfraß, Pflanzennährstoffen und Bodenstruktur-verbesserungsmitteln ist möglich.

10

Die Wirkstoffe können als solche, in Form ihrer Formulierungen oder den daraus durch weiteres Verdünnen bereiteten Anwendungsformen, wie gebrauchsfertige Lösungen, Suspensionen, Emulsionen, Pulver, Pasten und Granulate angewandt werden. Die Anwendung geschieht in üblicher Weise, z.B. durch Gießen, Spritzen, Sprühen, Streuen.

15

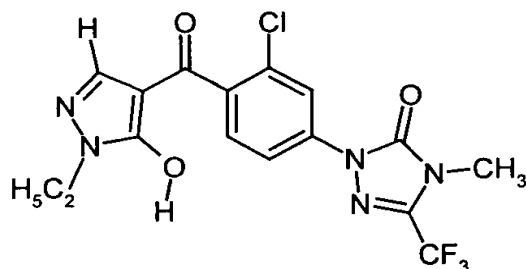
Die erfindungsgemäßen Wirkstoffe können sowohl vor als auch nach dem Auflaufen der Pflanzen appliziert werden. Sie können auch vor der Saat in den Boden eingearbeitet werden.

20

Die angewandte Wirkstoffmenge kann in einem größeren Bereich schwanken. Sie hängt im wesentlichen von der Art des gewünschten Effektes ab. Im allgemeinen liegen die Aufwandmengen zwischen 1 g und 10 kg Wirkstoff pro Hektar Bodenfläche, vorzugsweise zwischen 5 g und 5 kg pro ha.

25

Die Herstellung und die Verwendung der erfindungsgemäßen Wirkstoffe geht aus den nachfolgenden Beispielen hervor.

Herstellungsbeispiele:Beispiel 1

5 Eine Mischung aus 1,64 g (5 mMol) 4-Methyl-5-trifluormethyl-2-(3-chlor-4-carboxy-phenyl)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on, 0,62 g (5,5 mMol) 1-Ethyl-5-hydroxy-pyrazol und 40 ml Acetonitril wird bei Raumtemperatur (ca. 20°C) unter Rühren mit 1,13 g (5,5 mMol) Dicyclohexylcarbodiimid versetzt und die Reaktions-

10 mischung wird 16 Stunden bei Raumtemperatur gerührt. Dann werden 1,0 g (10 mMol) Triethylamin und 0,2 g (2 mMol) Trimethylsilylcyanid dazu gegeben und die Mischung wird drei Tage bei Raumtemperatur gerührt. Anschließend werden 60 ml einer 2%igen wässrigen Natriumcarbonat-Lösung dazu gegeben und die Mischung wird drei Stunden bei Raumtemperatur gerührt. Der ausgefallene Dicyclo-

15 hexylharnstoff wird durch Absaugen abgetrennt und die Mutterlauge zweimal mit Diethylether geschüttelt. Die wässrige Phase wird unter Rühren durch Zugabe von konz. Salzsäure auf einen pH-Wert von ca. 1 eingestellt. Das sich hierbei abscheidende ölige Produkt wird mit Methylenchlorid extrahiert, die Extraktionslösung mit Magnesiumsulfat getrocknet und filtriert. Vom Filtrat wird das Lösungsmittel im

20 Wasserstrahlvakuum sorgfältig abdestilliert.

Man erhält 1,5 g (72% der Theorie) 4-Methyl-5-trifluormethyl-2-[3-chlor-4-(1-ethyl-5-hydroxy-pyrazol-4-yl-carbonyl)-phenyl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on als amorphes Produkt.

logP (bei pH≈2 bestimmt): 2,63.

Analog zu Beispiel 1 sowie entsprechend der allgemeinen Beschreibung des erfindungsgemäßen Herstellungsverfahrens können beispielsweise auch die in der nachstehenden Tabelle 1 aufgeführten Verbindungen der allgemeinen Formel (I) -
5 bzw. der Formeln (IA), (IB) oder (IC) - hergestellt werden.

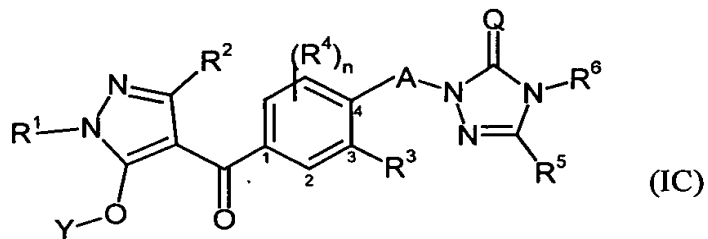
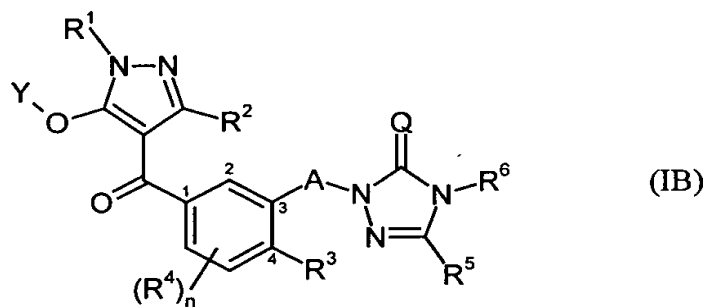
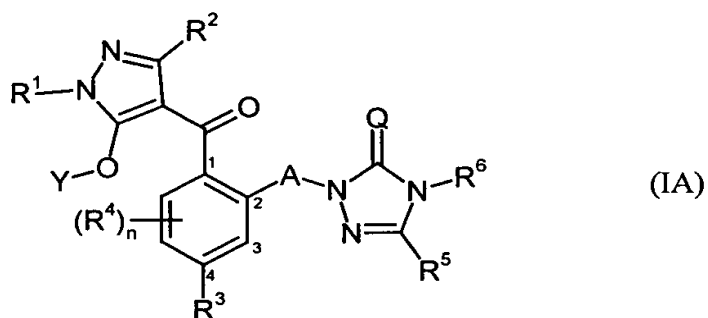



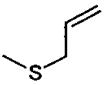





Tabelle 1: Beispiele für die Verbindungen der Formel (I), (IA), (IB), (IC)
Y steht hierbei jeweils für Wasserstoff

Bsp.- Nr.	A	Q	R ¹	R ²	R ³	(Posi- tion) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶	(Formel) Physikal. Daten
2	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	CF ₃	-	OC ₂ H ₅	CH ₃	(IA) logP = 2,34 ^{a)}
3	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	CF ₃	-	SCH ₃	CH ₃	(IA) logP = 2,22 ^{a)}
4	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	SO ₂ CH ₃	-	SCH ₃	CH ₃	(IA) logP = 1,24 ^{a)}
5	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	CF ₃	-	SC ₂ H ₅	CH ₃	(IA) logP = 2,58 ^{a)}
6	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	CF ₃	-	SC ₃ H ₇ -i	CH ₃	(IA) logP = 2,90 ^{a)}
7	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	CF ₃	-	OCH ₃		(IA) logP = 2,28 ^{a)}
8	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	F	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃	(IA) logP = 1,61 ^{a)}
9	CH ₂	O	CH ₃	CH ₃	F	-	N(CH ₃) ₂	CH ₃	(IA) logP = 1,32 ^{a)}
10	CH ₂	O	CH ₃	CH ₃	F	-	OCH ₃		(IA) logP = 1,50 ^{a)}
11	CH ₂	O	CH ₃	CH ₃	F	-	OC ₂ H ₅		(IA) logP = 1,80 ^{a)}
12	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Br	-		CH ₃	(IA) logP = 2,69 ^{a)}
13	-	O	C ₂ H ₅	H	H	(6-) CF ₃	CF ₃	CH ₃	(IB) logP = 2,83 ^{a)}
14	-	O	C ₂ H ₅	H	H	(2-) Cl	CH ₃	CH ₃	(IC) logP = 1,71 ^{a)}

Bsp.- Nr.	A	Q	R ¹	R ²	R ³	(Posi- tion) (R ⁴) _n	R ⁵	R ⁶	(Formel) Physikal. Daten
15	-	O	C ₂ H ₅	H	H	-	CF ₃	CH ₃	(IA) logP = 1,95 ^{a)}
16	-	O	C ₂ H ₅	H	Cl	-	CF ₃	CH ₃	(IA) logP = 2,47 ^{a)}
17	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(4-) Cl	CF ₃	CH ₃	(IB) logP = 2,30 ^{a)}
18	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(4-) Cl	SCH ₃	CH ₃	(IB) logP = 1,91 ^{a)}
19	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(4-) Cl	OC ₂ H ₅	CH ₃	(IB) logP = 2,01 ^{a)}
20	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(4-) Cl			(IB) logP = 2,14 ^{a)}
21	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(4-) Cl	OCH ₃	CH ₃	(IB) logP = 1,69 ^{a)}
22	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(4-) Cl	OC ₃ H _{7-i}	CH ₃	(IB) logP = 2,31 ^{a)}
23	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(4-) Cl	OCH ₂ CF ₃	CH ₃	(IB) logP = 2,33 ^{a)}
24	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(4-) Cl	Br	CH ₃	(IB) logP = 1,81 ^{a)}
25	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(4-) Cl	H	CH ₃	(IB) logP = 1,28 ^{a)}
26	CH ₂	O	C ₂ H ₅	H	Cl	(4-) Cl		CH ₃	(IB) logP = 1,82 ^{a)}

Die Bestimmung der in Tabelle 1 angegebenen logP-Werte erfolgte gemäß EEC-Directive 79/831 Annex V.A8 durch HPLC (High Performance Liquid Chromatography) an einer Phasenumkehrsäule (C 18). Temperatur: 43°C.

(a) Eluenten für die Bestimmung im sauren Bereich: 0,1% wässrige Phosphorsäure, Acetonitril; linearer Gradient von 10% Acetonitril bis 90% Acetonitril - entsprechende Messergebnisse sind in Tabelle 1 mit a) markiert.

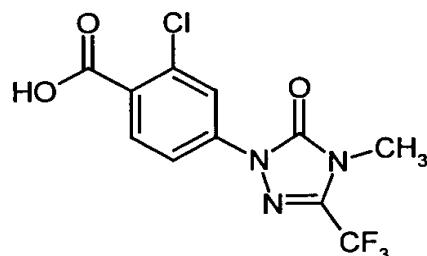
- 5 (b) Eluenten für die Bestimmung im neutralen Bereich: 0,01-molare wässrige Phosphatpuffer-Lösung, Acetonitril; linearer Gradient von 10% Acetonitril bis 90% Acetonitril - entsprechende Messergebnisse sind in Tabelle 1 mit b) markiert.

10

Die Eichung erfolgte mit unverzweigten Alkan-2-onen (mit 3 bis 16 Kohlenstoffatomen), deren logP-Werte bekannt sind (Bestimmung der logP-Werte anhand der Retentionszeiten durch lineare Interpolation zwischen zwei aufeinanderfolgenden Alkanonen).

15

Die lambda-max-Werte wurden an Hand der UV-Spektren von 200 nm bis 400 nm in den Maxima der chromatographischen Signale ermittelt.

Ausgangsstoffe der Formel (III):Beispiel (III-1)

5

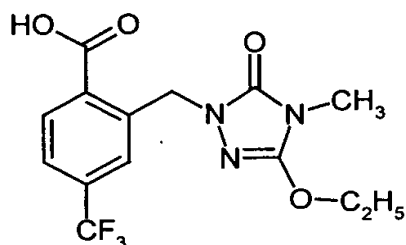
4,5 g (15 mMol) 2-(3-Chlor-4-cyano-phenyl)-4-methyl-5-trifluormethyl-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on werden in 80 ml 60%iger Schwefelsäure aufgenommen und die Mischung wird 6 Stunden unter Rückfluß erhitzt. Nach Abkühlen auf Raumtemperatur wird das kristallin angefallene Produkt durch Absaugen isoliert.

10

Man erhält 4,5 g (91% der Theorie) 2-(3-Carboxy-4-chlor-phenyl)-4-methyl-5-trifluormethyl-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on vom Schmelzpunkt 223°C.

Beispiel (III-2)

15



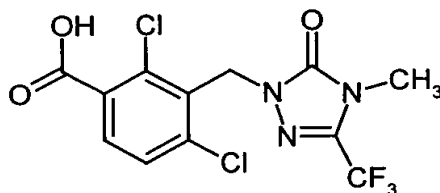
20

2 g (4,9 mMol) 5-Brom-4-methyl-2-(2-ethoxycarbonyl-5-trifluormethyl-benzyl)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on (vgl. Beispiel IV-1) werden in 30 ml 10%iger ethanolscher Kalilauge gelöst und 2 Stunden unter Rückfluß erhitzt. Das Reaktionsgemisch wird im Wasserstrahlvakuum eingeeengt, in 20 ml Wasser aufgenommen und mit verdünnter Salzsäure angesäuert. Der ausfallende Feststoff wird filtriert und getrocknet.

Man erhält 1,2 g (71% der Theorie) 5-Ethoxy-4-methyl-2-(2-carboxy-5-trifluor-methyl-benzyl)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on als festes Produkt.

5 logP: 2,18a)

Beispiel (III-3)



10 13,4 g (35 mMol) 4-Methyl-5-trifluormethyl-2-(2,6-dichlor-3-methoxycarbonyl-benzyl)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on werden in 60 ml 1,4-Dioxan vorgelegt und eine Lösung von 1,54 g (38,5 mMol) Natriumhydroxid in 20 ml Wasser wird bei Raumtemperatur langsam eindosiert. Die Reaktionsmischung wird 150 Minuten bei 60°C gerührt und anschließend im Wasserstrahlvakuum eingengt. Der Rückstand

15 wird in 100 ml Wasser gelöst und durch Zugabe von konz. Salzsäure wird der pH-Wert der Lösung auf 1 eingestellt. Das hierbei kristallin angefallene Produkt wird durch Absaugen isoliert.

20 Man erhält 11,7 g (90% der Theorie) 4-Methyl-5-trifluormethyl-2-(2,6-dichlor-3-carboxy-benzyl)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on vom Schmelzpunkt 207°C.

Analog zu den Beispielen (III-1) bis (III-3) können beispielsweise auch die in der nachstehenden Tabelle 2 aufgeführten Verbindungen der allgemeinen Formel (III) hergestellt werden.

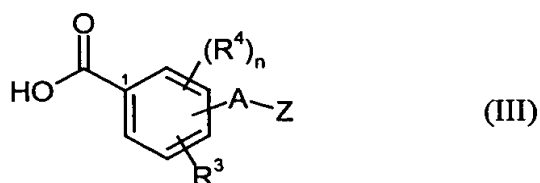
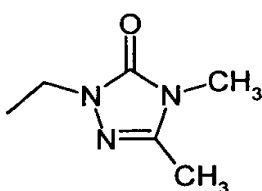
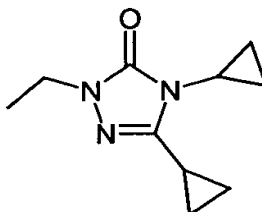
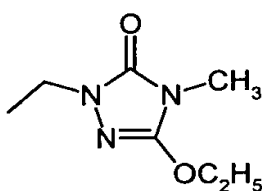
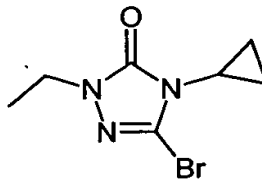
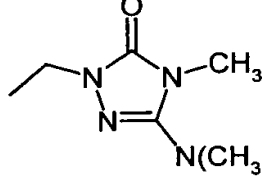
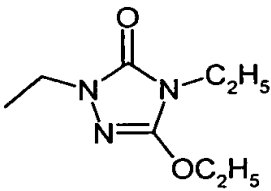
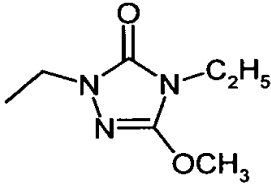
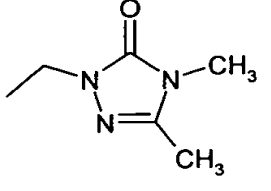
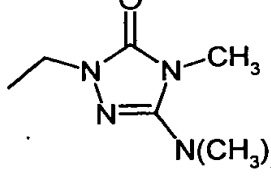
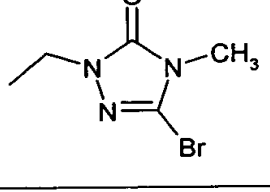
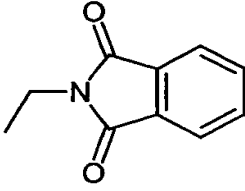
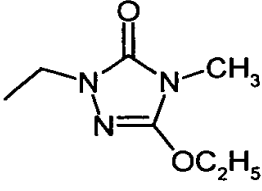
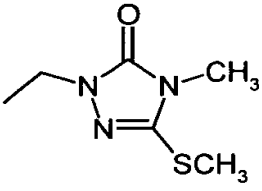
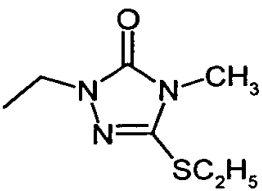
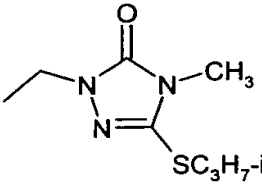
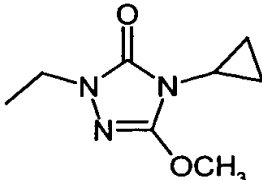
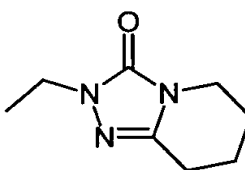
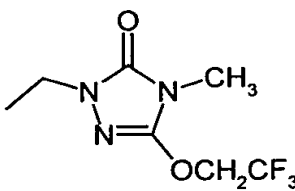
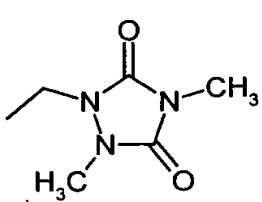
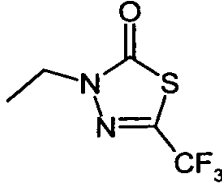


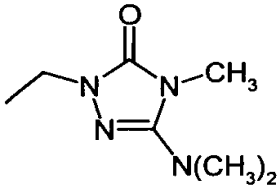
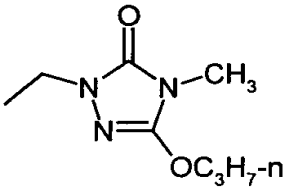
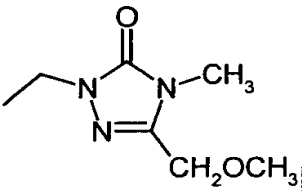
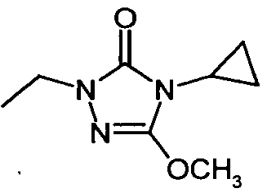
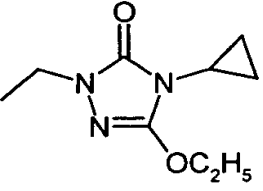
Tabelle 2: Beispiele für die Verbindungen der Formel (III)

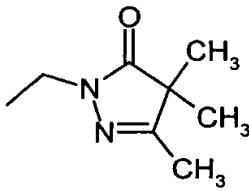
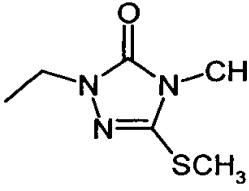
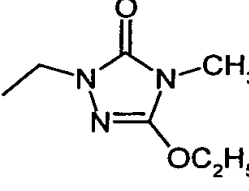
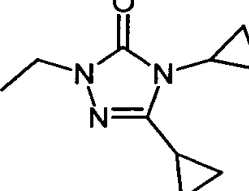
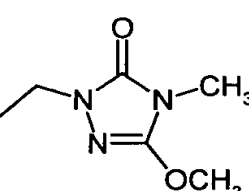
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-4	(4-) Cl	-	(2-) 	logP = 1,39 ^{a)}
III-5	(4-) SO ₂ CH ₃	-	(3-) 	logP = 1,47 ^{a)}
III-6	(4-) F	-	(2-) 	logP = 1,73 ^{a)}
III-7	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 1,65 ^{a)}
III-8	(4-) Br	-	(2-) 	logP = 1,74 ^{a)}

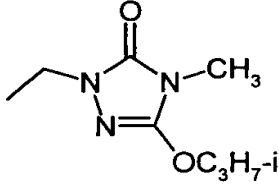
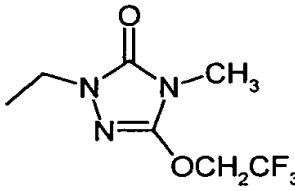
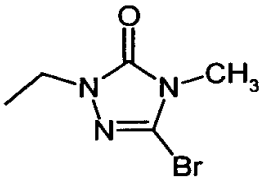
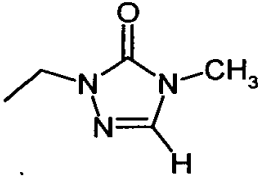
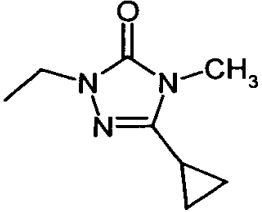
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-9	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 2,43 ^{a)}
III-10	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 2,12 ^{a)}
III-11	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 1,61 ^{a)}
III-12	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 1,93 ^{a)}
III-13	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 2,01 ^{a)}

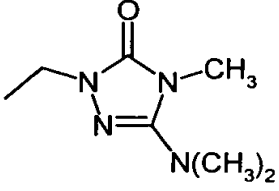
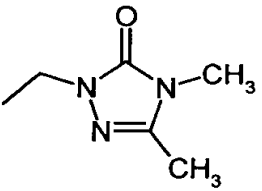
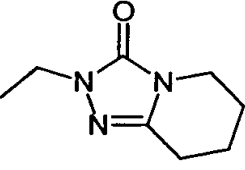
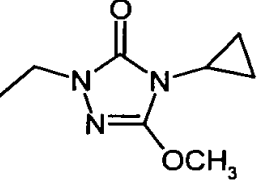
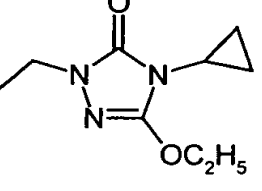
Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-14	(4-) CF_3	-	(2-) 	$\log P = 1,77^a$
III-15	(3-) CH_3	-	(2-) 	$\log P = 1,70^a$
III-16	(4-) SO_2CH_3	-	(2-) 	$\log P = 1,07^a$
III-17	(4-) CF_3	-	(2-) 	$\log P = 2,35^a$
III-18	(4-) CF_3	-	(2-) 	$\log P = 2,63^a$

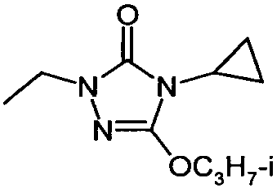
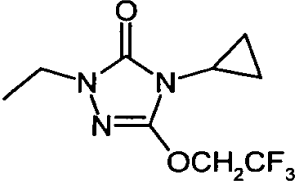
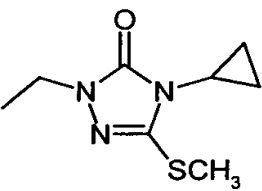
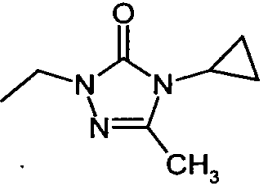
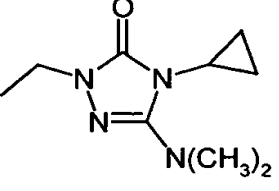
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-19	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 2,13 ^{a)}
III-20	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 1,82 ^{a)}
III-21	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 2,48 ^{a)}
III-22	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 1,73 ^{a)}
III-23	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 3,11 ^{a)}

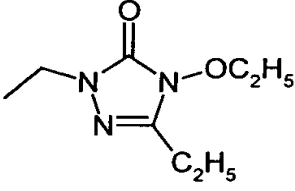
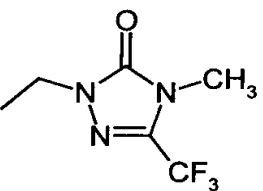
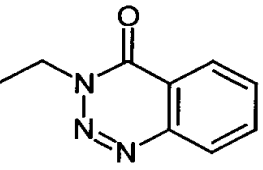
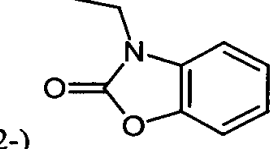
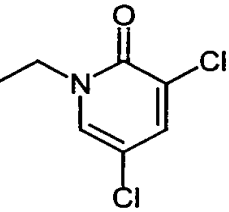
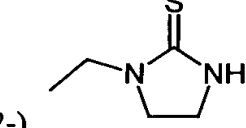
Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-24	(4-) F	-	(2-) 	$\log P = 1,43^a$
III-25	(4-) F	-	(2-) 	$\log P = 1,97^a$
III-26	(4-) F	-	(2-) 	$\log P = 1,30^a$
III-27	(4-) F	-	(2-) 	$\log P = 1,63^a$
III-28	(4-) F	-	(2-) 	$\log P = 1,93^a$

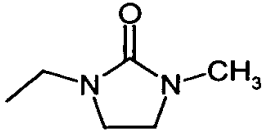
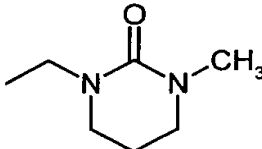
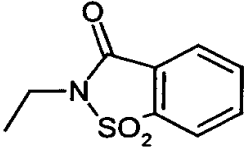
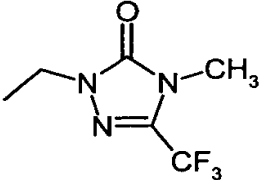
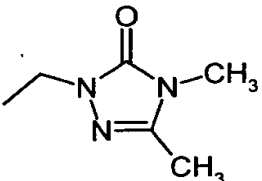
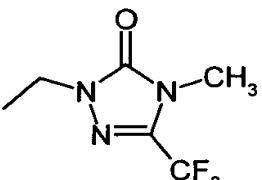
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-29	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 1,78 ^{a)}
III-30	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 230°C logP = 1,63 ^{a)}
III-31	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 190°C logP = 1,73 ^{a)}
III-32	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 210°C logP = 1,87 ^{a)}
III-33	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 210°C logP = 1,43 ^{a)}

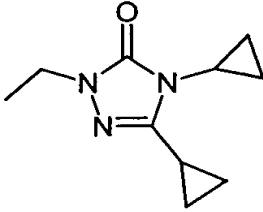
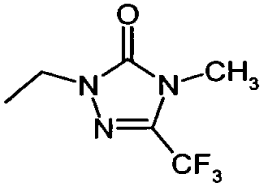
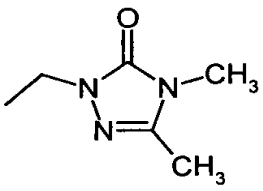
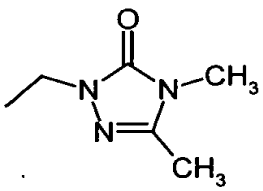
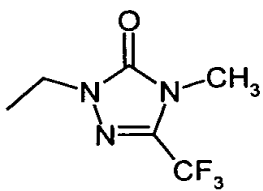
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-34	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 164°C logP = 2,01 ^{a)}
III-35	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 168°C logP = 2,04 ^{a)}
III-36	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 218°C logP = 1,53 ^{a)}
III-37	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 259°C logP = 0,98 ^{a)}
III-38	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 210°C logP = 1,56 ^{a)}

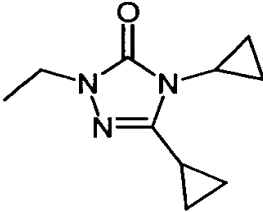
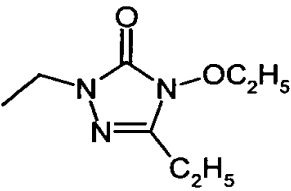
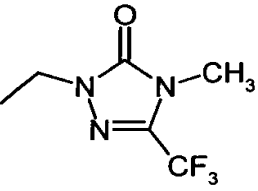
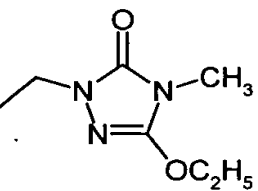
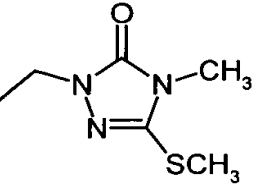
Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-39	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 197°C logP = 1,51 ^{a)}
III-40	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 262°C logP = 1,11 ^{a)}
III-41	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 249°C logP = 1,30 ^{a)}
III-42	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 200°C logP = 1,71 ^{a)}
III-43	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 189°C logP = 2,01 ^{a)}

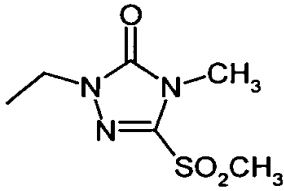
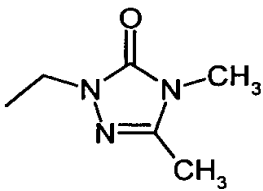
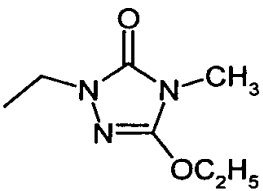
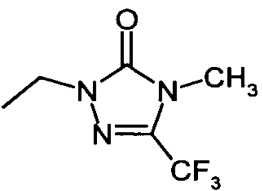
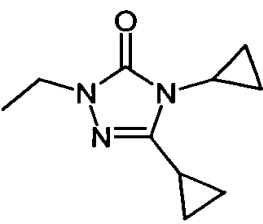
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-44	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 178°C logP = 2,28 ^{a)}
III-45	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 161°C logP = 2,31 ^{a)}
III-46	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 200°C logP = 1,98 ^{a)}
III-47	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 201°C logP = 1,39 ^{a)}
III-48	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 207°C logP = 1,77 ^{a)}

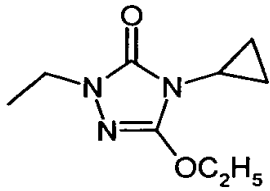
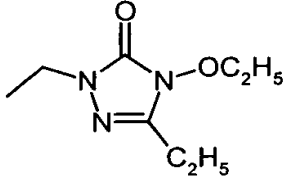
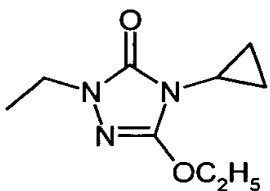
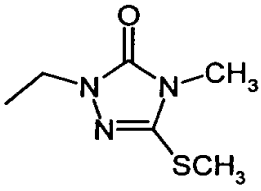
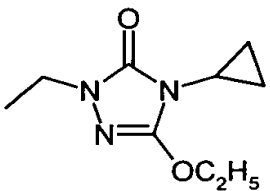
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-49	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	Fp.: 140°C logP = 1,88 ^{a)}
III-50	(4-) OCH ₂ CHF ₂	-	(2-) 	Fp.: 154°C logP = 2,14 ^{a)}
III-51	-	-	(2-) 	Fp.: 214°C logP = 1,87 ^{a)}
III-52	-	-	(2-) 	Fp.: 194°C logP = 2,07 ^{a)}
III-53	-	-	(2-) 	Fp.: 181°C logP = 1,97 ^{a)}
III-54	-	-	(2-) 	Fp.: 251°C logP = 1,14 ^{a)}

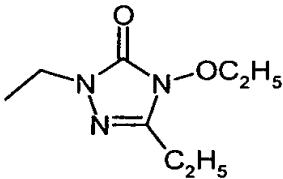
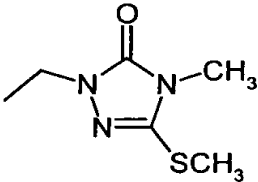
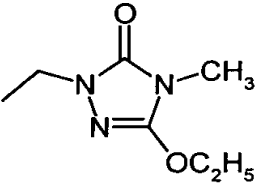
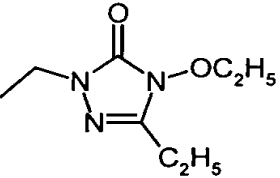
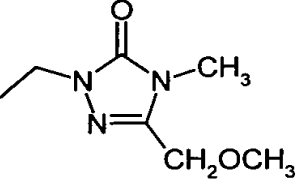
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-55	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	logP = 1,38 ^{a)}
III-56	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	logP = 1,48 ^{a)}
III-57	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	
III-58	(4-) Cl	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D ₆ , δ): 5,42 ppm.
III-59	(4-) CF ₃	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D ₆ , δ): 5,48 ppm.
III-60	(4-) CF ₃	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D ₆ , δ): 5,60 ppm. logP = 2,47 ^{a)}

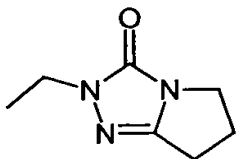
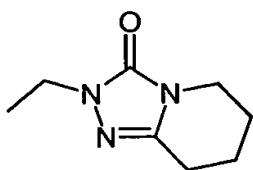
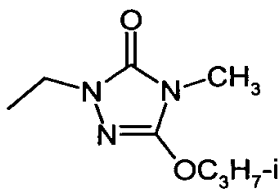
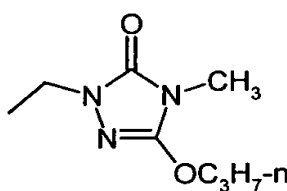
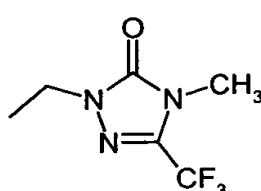
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-61	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 2,33 ^{a)}
III-62	(4-) SO ₂ CH ₃	-	(3-) 	¹ H-NMR (DMSO-D ₆ , δ): 5,14 ppm.
III-63	(4-) SO ₂ CH ₃	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D ₆ , δ): 5,27 ppm.
III-64	(4-) Cl	-	(3-) 	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,12 ppm.
III-65	(4-) Cl	-	(3-) 	¹ H-NMR (DMSO-D ₆ , δ): 5,20 ppm.

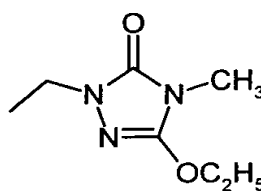
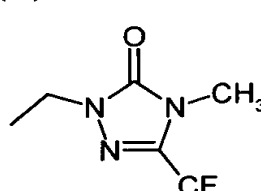
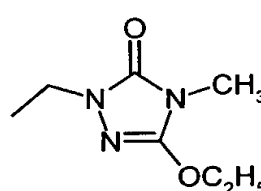
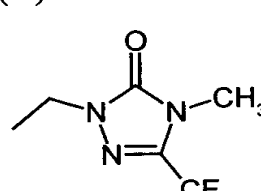
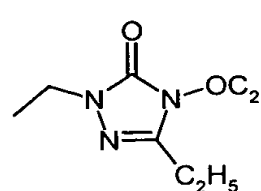
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-66	(4-) Cl	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D ₆ , δ): 5,03 ppm.
III-67	(4-) Br	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D ₆ , δ): 5,24 ppm.
III-68	(4-) Br	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D ₆ , δ): 5,39 ppm.
III-69	(4-) F	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D ₆ , δ): 5,19 ppm.
III-70	(4-) F	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D ₆ , δ): 5,30 ppm.

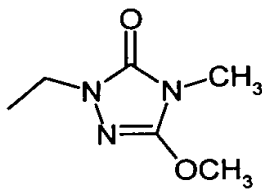
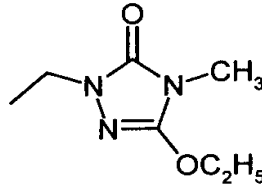
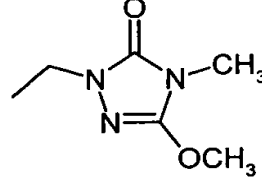
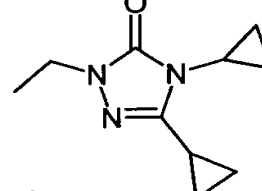
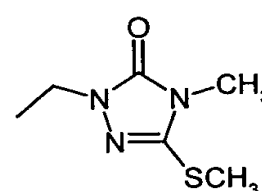
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-71	(4-) F	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D6, δ): 5,43 ppm.
III-72	(4-) Br	-	(3-) 	¹ H-NMR, (CDCl ₃ , δ): 5,10 ppm.
III-73	(4-) Br	-	(3-) 	¹ H-NMR (DMSO-D6, δ): 5,03 ppm.
III-74	(4-) Br	-	(3-) 	¹ H-NMR (DMSO-D6, δ): 5,19 ppm.
III-75	(4-) Br	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D6, δ): 5,01 ppm.

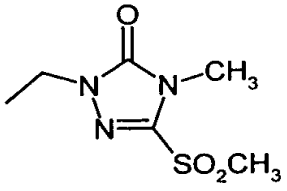
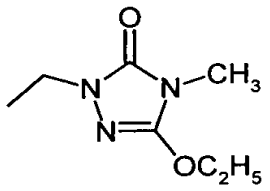
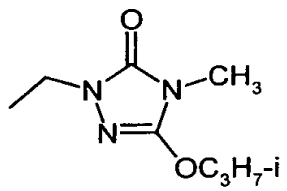
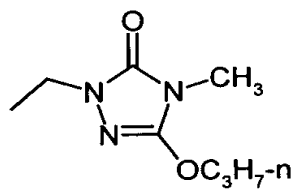
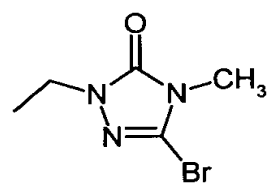
Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-76	(4-) Cl	-	(2-) 	$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-D ₆ , δ): 5,14 ppm.
III-77	(4-) Cl	-	(2-) 	$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-D ₆ , δ): 5,25 ppm.
III-78	(4-) NO ₂	-	(2-) 	$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-D ₆ , δ): 5,23 ppm.
III-79	(4-) NO ₂	-	(2-) 	$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-D ₆ , δ): 5,37 ppm.
III-80	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 2,46 ^{a)}

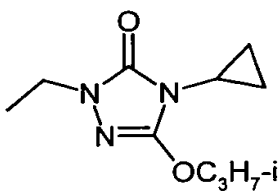
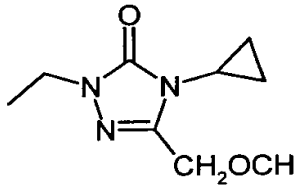
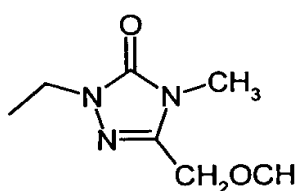
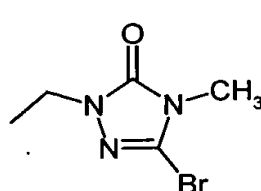
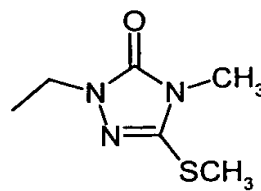
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-81	(4-) CF ₃	-	(2-) 	¹ H-NMR (DMSO-D ₆ , δ): 5,31 ppm.
III-82	(4-) CF ₃	-	(2-) 	logP = 2,08 ^{a)}
III-83	(4-) OCH ₃	-	(2-) 	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,38 ppm.
III-84	(4-) OCH ₃	-	(2-) 	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,43 ppm.
III-85	(4-) CF ₃	-	(2-) 	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,47 ppm.

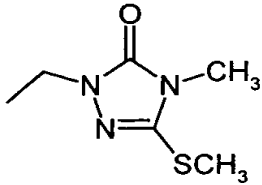
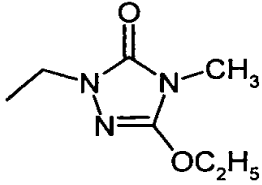
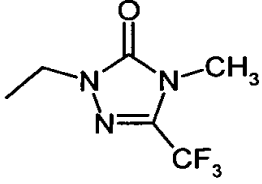
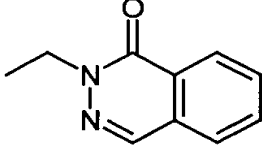
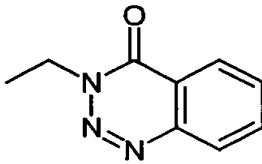
Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-86	(4-) Br	-	(2-) 	$\log P = 1,44^a$
III-87	(4-) Br	-	(2-) 	$\log P = 1,63^a$
III-88	(4-) Br	-	(2-) 	$\log P = 2,27^a$
III-89	(4-) Br	-	(2-) 	$\log P = 2,31^a$
III-90	-	-	(2-) 	$\log P = 1,82^a$

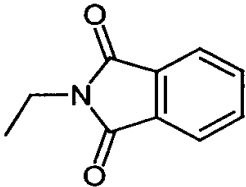
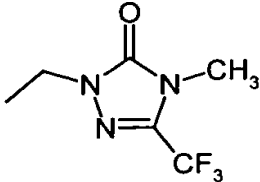
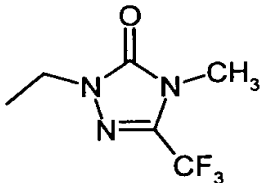
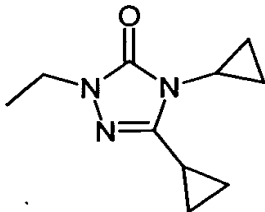
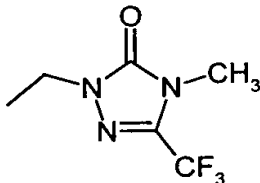
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-91	(4-) Br	-	(2-) 	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,32 ppm.
III-92	(4-) Br	-	(2-) 	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,53 ppm.
III-93	(4-) F	-	(2-) 	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,39 ppm.
III-94	(4-) F	-	(2-) 	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,57 ppm.
III-95	(4-) F	-	(2-) 	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,44 ppm.

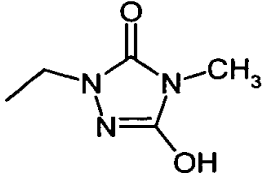
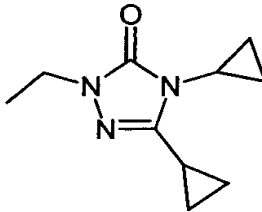
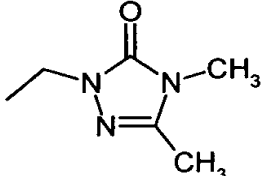
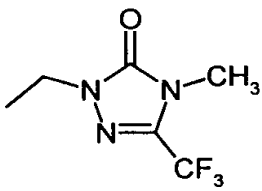
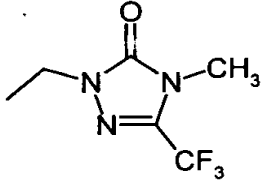
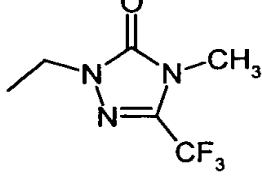
Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-96	(4-) F	-	(2-) 	$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , δ): 5,41 ppm.
III-97	-	-	(2-) 	$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , δ): 5,34 ppm.
III-98	-	-	(2-) 	$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , δ): 5,38 ppm.
III-99	-	-	(2-) 	$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , δ): 5,26 ppm.
III-100	-	-	(2-) 	$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , δ): 5,43 ppm.

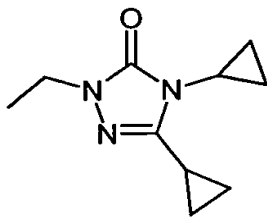
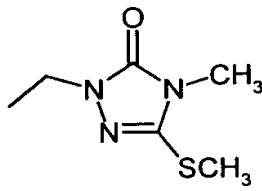
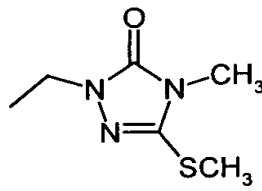
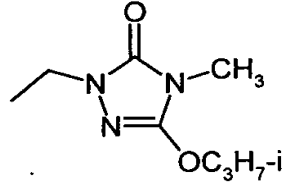
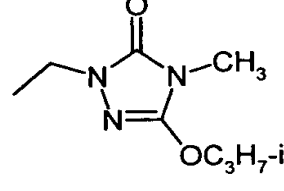
Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-101	-	-	(2-) 	$\log P = 1,23^a$
III-102	(4-) SO_2CH_3	-	(2-) 	$\log P = 1,14^a$
III-103	(4-) CF_3	-	(2-) 	$\log P = 2,45^a$
III-104	(4-) CF_3	-	(2-) 	$\log P = 2,48^a$
III-105	(4-) Br	-	(2-) 	$\log P = 1,85^a$

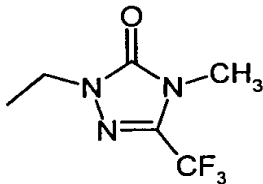
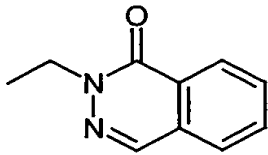
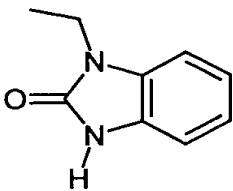
Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-106	(4-) CF_3	-	(3-) 	$\log P = 2,74^a$
III-107	(4-) CF_3	-	(2-) 	$\log P = 2,01^a$
III-108	(4-) CF_3	-	(2-) 	$\log P = 1,79^a$
III-109	(4-) CF_3	-	(2-) 	$\log P = 1,65^a$
III-110	(4-) Br	-	(2-) 	$\log P = 1,90^a$

Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-111	(4-) Cl	-	(2-) 	logP = 1,83 ^{a)}
III-112	(4-) I	-	(2-) 	logP = 2,06 ^{a)}
III-113	(4-) I	-	(2-) 	Fp.: 104°C logP = 2,39 ^{a)}
III-114	(4-) Br	-	(2-) 	Fp.: 191°C
III-115	(4-) Br	-	(2-) 	Fp.: 213°C

Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-116	-	-	(2-) 	
III-117	-	-	(2-) 	Fp.: 112°C
III-118	(4-) CF_3	-	(2-) 	Fp.: 158°C
III-119	(4-) CF_3	-	(2-) 	Fp.: 162°C
III-120	(4-) Cl	(5-) Cl	(2-) 	Fp.: 167°C

Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-121	-	-		Fp.: 188°C
III-122	-	-	(2-) 	
III-123	-	-		Fp.: 131°C
III-124	(4-) Cl	-	(2-) 	Fp.: 109°C
III-125	(4-) I	-	(2-) 	Fp.: 104°C
III-126	(4-) Br	-	(2-) 	Fp.: 99°C

Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-127	(4-) Br	-	(2-) 	Fp.: 174°C
III-128	-	-	(2-) 	Fp.: 122°C
III-129	(4-) Br	-	(2-) 	Fp.: 164°C
III-130	-	-	(2-) 	Fp.: 154°C
III-131	(4-) Br	-	(2-) 	Fp.: 161°C

Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	Physikal. Daten
III-132	(4-) CN	-	(2-) 	Fp.: 196°C
III-133	-	-	(2-) 	Fp.: 192°C
III-134	-	-		

Die Bestimmung der in Tabelle 2 angegebenen logP-Werte erfolgte gemäß EEC-Directive 79/831 Annex V.A8 durch HPLC (High Performance Liquid Chromatography) an einer Phasenumkehrsäule (C 18). Temperatur: 43°C.

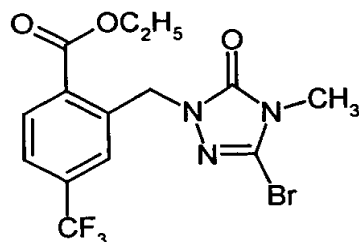
(a) Eluenten für die Bestimmung im sauren Bereich: 0,1% wässrige Phosphorsäure, Acetonitril; linearer Gradient von 10% Acetonitril bis 90% Acetonitril - entsprechende Messergebnisse sind in Tabelle 1 mit a) markiert.

10 (b) Eluenten für die Bestimmung im neutralen Bereich: 0,01-molare wässrige Phosphatpuffer-Lösung, Acetonitril; linearer Gradient von 10% Acetonitril bis 90% Acetonitril - entsprechende Messergebnisse sind in Tabelle 1 mit b) markiert.

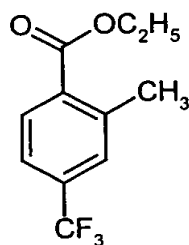
15 Die Eichung erfolgte mit unverzweigten Alkan-2-onen (mit 3 bis 16 Kohlenstoffatomen), deren logP-Werte bekannt sind (Bestimmung der logP-Werte anhand der

Retentionszeiten durch lineare Interpolation zwischen zwei aufeinanderfolgenden Alkanonen).

5 Die λ -max-Werte wurden an Hand der UV-Spektren von 200 nm bis 400 nm in den Maxima der chromatographischen Signale ermittelt.

Ausgangsstoffe der Formel (IV):Beispiel (IV-1)

5

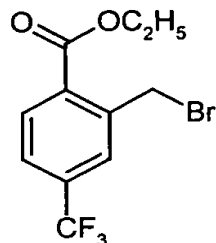
Stufe 1

10

10 g (49 mMol) 2-Methyl-4-trifluormethyl-benzoesäure werden in 150 ml Ethanol gelöst und mit 1 ml konz. Schwefelsäure versetzt. Nach 24 Stunden Erhitzen unter Rückfluß wird die Lösung eingengt, in Methylenchlorid aufgenommen und mit gesättigter wäßriger Natriumhydrogencarbonat-Lösung extrahiert. Die Methylenchlorid-Phase wird über Natriumsulfat getrocknet und im Wasserstrahlvakuum eingengt.

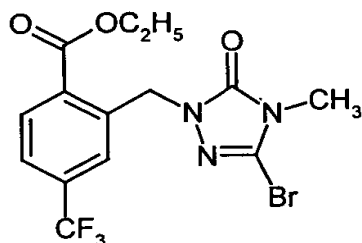
15

Man erhält 9 g (80% der Theorie) 2-Methyl-4-trifluormethyl-benzoesäure-ethylester als amorphen Rückstand.

Stufe 2

5 9 g (39 mMol) 2-Methyl-4-trifluormethyl-benzoesäure-ethylester werden in 200 ml Tetrachlormethan gelöst und mit 7 g (39 mMol) *N*-Brom-succinimid und 0.1 g Dibenzoylperoxid versetzt. Nach 6 Stunden Erhitzen unter Rückfluß wird das abgeschiedene Succinimid abfiltriert und das Filtrat im Wasserstrahlvakuum eingeeengt.

10 Man erhält 12 g eines amorphen Rückstandes, der neben 2-Brommethyl-4-trifluormethyl-benzoesäure-ethylester noch 17 % 2,2-Dibrommethyl-4-trifluormethyl-benzoesäure-ethylester und 12% 2-Methyl-4-trifluormethyl-benzoesäure-ethylester enthält.

15 Stufe 3

20 4 g 2-Brommethyl-4-trifluormethyl-benzoesäure-ethylester (ca. 70%ig) und 2.28 g (12,8 mMol) 5-Brom-4-methyl-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on werden in 150 ml Acetonitril gelöst, mit 5.3 g (38,4 mMol) Kaliumcarbonat versetzt und unter kräftigem Rühren 2 Stunden zum Rückfluß erhitzt. Das Reaktionsgemisch wird in Wasser aufgenommen und mit Methylenchlorid mehrfach extrahiert. Die gesammelten

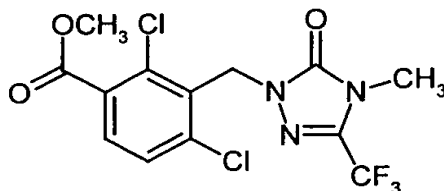
Methylenchlorid-Phasen werden über Natriumsulfat getrocknet, im Wasserstrahlvakuum eingeeengt und chromatographiert.

5 Man erhält 2 g (38 % der Theorie) 5-Brom-4-methyl-2-(2-ethoxycarbonyl-5-trifluormethyl-benzyl)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on als amorphes Produkt.

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , δ): 5,46 ppm.

Beispiel (IV-2)

10



15

6,7 g (40 mMol) 4-Methyl-5-trifluormethyl-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on werden in 150 ml Acetonitril vorgelegt und mit 11 g (80 mMol) Kaliumcarbonat ver-
rührt. Nach Erwärmen der Mischung auf 50°C wird dann eine Lösung von 13,1 g
(44 mMol) 3-Brommethyl-2,4-dichlor-benzoesäure-methylester in 20 ml Acetonitril
unter Rühren tropfenweise dazu gegeben und die Reaktionsmischung wird noch
15 Stunden unter Rühren zum Rückfluß erhitzt. Anschließend wird im Wasserstrahl-
vakuum eingeeengt, der Rückstand in Methylenchlorid aufgenommen, mit 1N-Salz-
säure gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und filtriert. Das Filtrat wird unter
vermindertem Druck eingeeengt, der Rückstand mit Petrolether digeriert und das
kristallin angefallene Produkt durch Absaugen isoliert.

20

25

Man erhält 14,9 g (97% der Theorie) 4-Methyl-5-trifluormethyl-2-(2,6-dichlor-3-methoxycarbonyl-benzyl)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on vom Schmelzpunkt 109°C.

Analog zu den Beispielen (IV-1) und (IV-2) können beispielsweise auch die in der nachstehenden Tabelle 3 aufgeführten Verbindungen der allgemeinen Formel (IV) hergestellt werden.

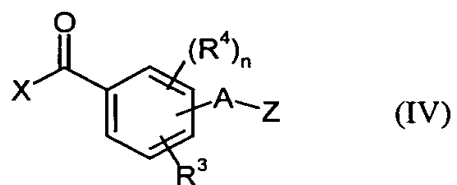
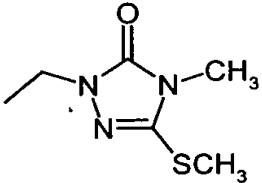
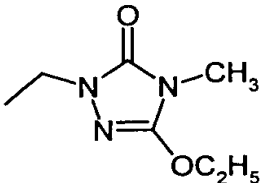
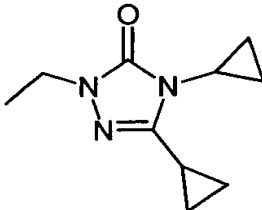
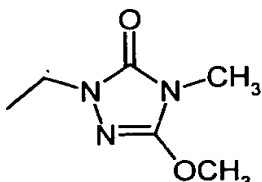
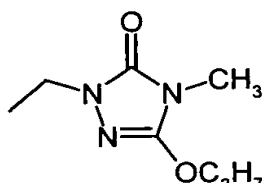
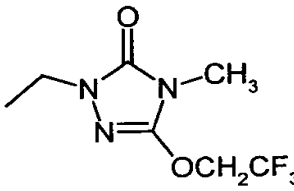
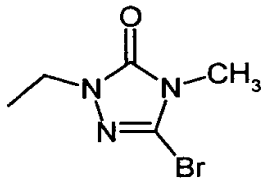
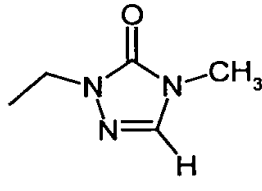
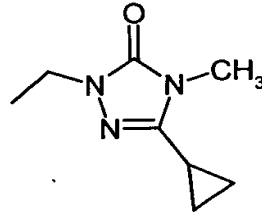
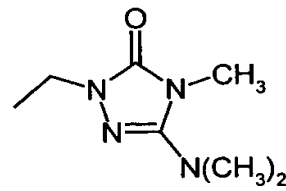
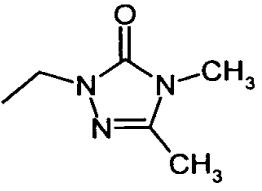
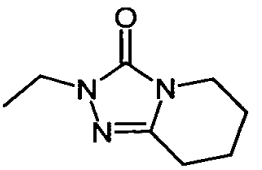
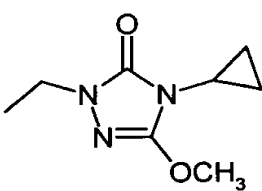
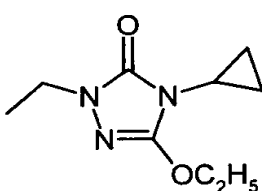
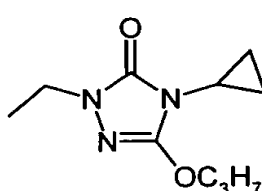
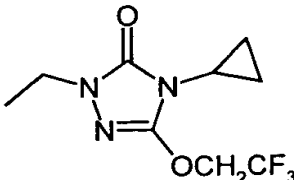
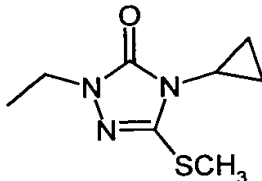
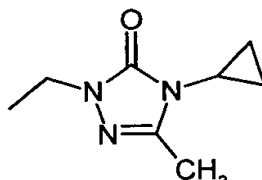
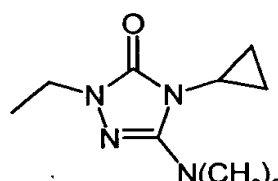
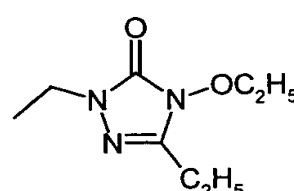


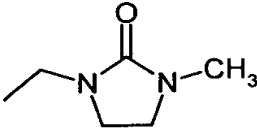
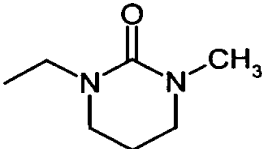
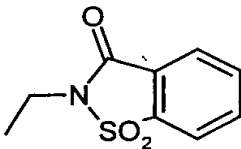
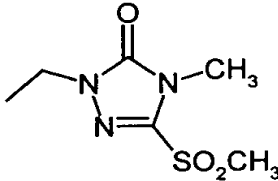
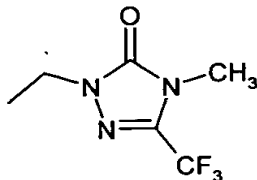
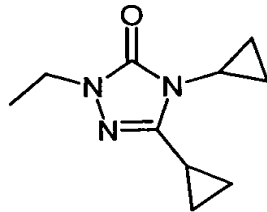
Tabelle 3: Beispiele für die Verbindungen der Formel (IV)

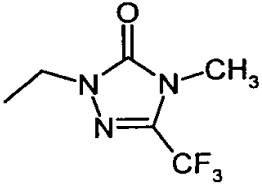
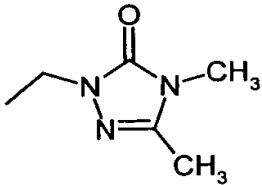
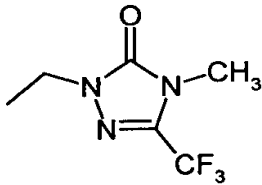
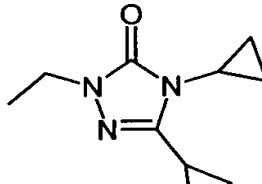
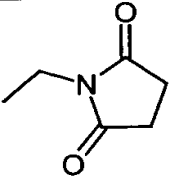
Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-3	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 229°C logP = 2,27 ^{a)}
IV-4	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 120°C logP = 2,38 ^{a)}
IV-5	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 127°C logP = 2,55 ^{a)}
IV-6	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 121°C logP = 2,04 ^{a)}
IV-7	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 68°C logP = 2,73 ^{a)}

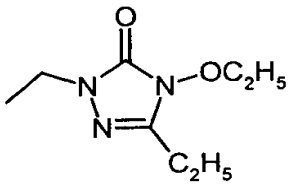
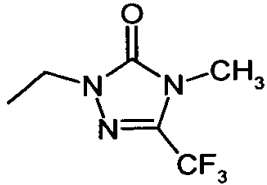
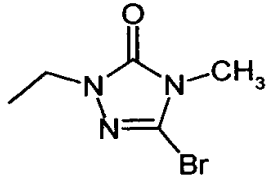
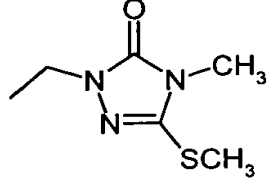
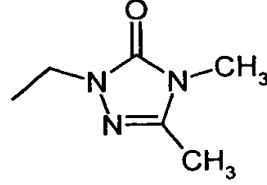
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-8	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 129°C logP = 2,72 ^{a)}
IV-9	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 164°C logP = 2,18 ^{a)}
IV-10	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 158°C logP = 1,55 ^{a)}
IV-11	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 106°C logP = 2,16 ^{a)}
IV-12	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 126°C logP = 2,11 ^{a)}

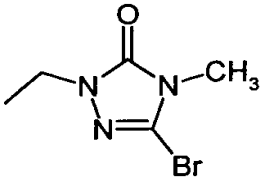
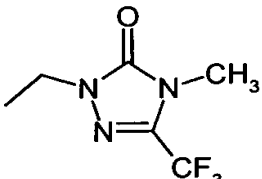
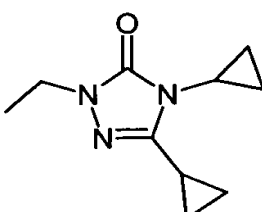
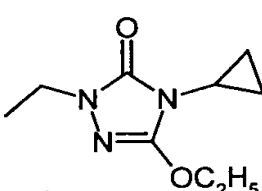
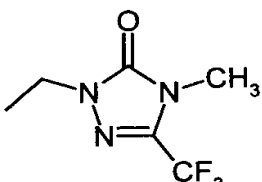
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-13	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 146°C logP = 1,65 ^{a)}
IV-14	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 178°C logP = 1,86 ^{a)}
IV-15	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 97°C logP = 2,36 ^{a)}
IV-16	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 99°C logP = 2,73 ^{a)}
IV-17	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 56°C logP = 3,08 ^{a)}

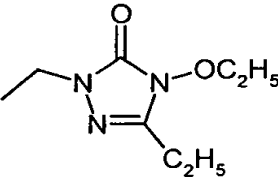
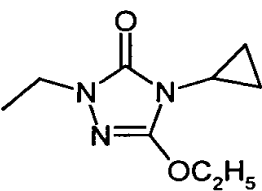
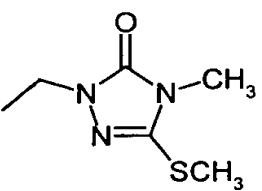
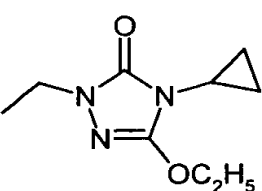
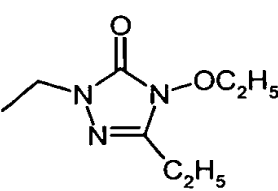
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-18	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 102°C logP = 3,05 ^{a)}
IV-19	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 131°C logP = 2,70 ^{a)}
IV-20	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 135°C logP = 1,97 ^{a)}
IV-21	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 143°C logP = 2,42 ^{a)}
IV-22	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 85°C logP = 2,58 ^{a)}

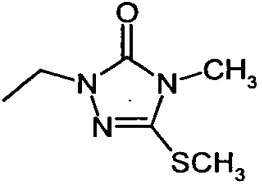
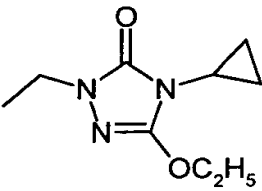
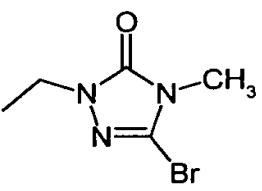
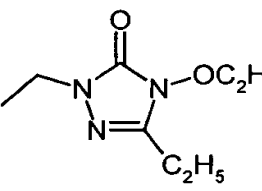
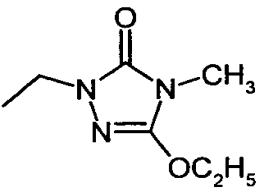
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _a	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-23	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	logP = 1,98 ^{a)}
IV-24	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	logP = 2,07 ^{a)}
IV-25	(2-) Cl	(4-) Cl	(3-) 	OCH ₃	Fp.: 157°C logP = 2,94 ^{a)}
IV-26	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,53 ppm.
IV-27	(4-) NO ₂	-	(3-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,48 ppm.
IV-28	(4-) NO ₂	-	(3-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,30 ppm.

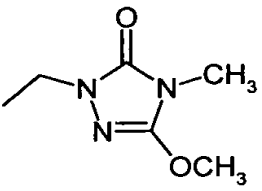
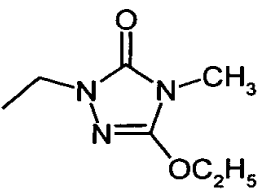
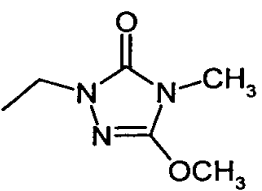
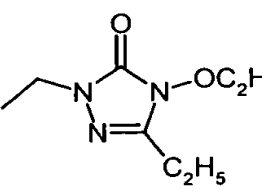
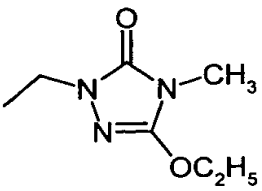
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-29	(4-) SO ₂ CH ₃	-	(3-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,61 ppm.
IV-30	(4-) Cl	-	(3-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,08 ppm.
IV-31	(4-) Cl	-	(3-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,17 ppm.
IV-32	(4-) Cl	-	(3-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,00 ppm
IV-33	(4-) SO ₂ CH ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 1,53 ^{a)}

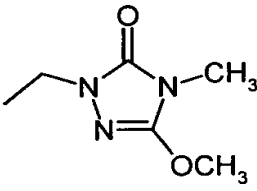
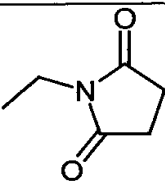
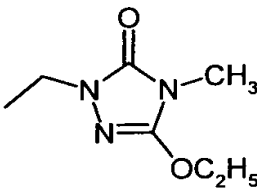
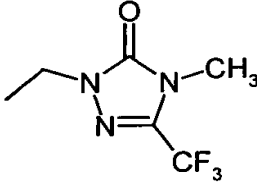
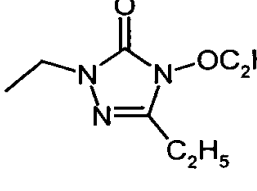
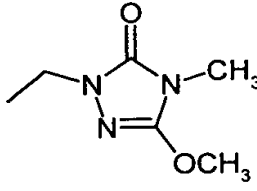
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-34	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,24 ^{a)}
IV-35	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,40 ^{a)}
IV-36	(4-) F	-	(3-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,41 ^{a)}
IV-37	(4-) F	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,45 ^{a)}
IV-38	(4-) Br	-	(3-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,06 ^{a)}

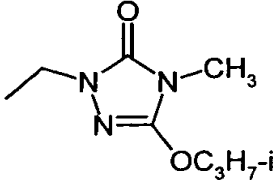
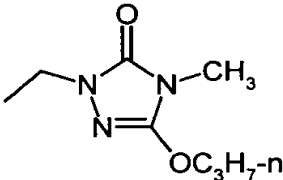
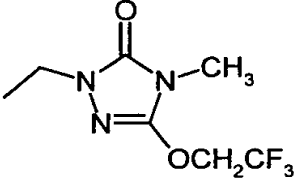
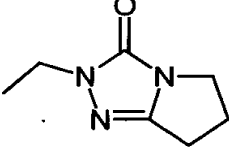
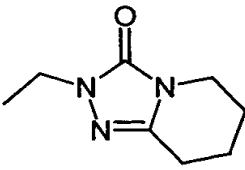
Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-39	(4-) Br	-	(3-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,64 ^{a)}
IV-40	(4-) Br	-	(3-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,23 ^{a)}
IV-41	(4-) Br	-	(3-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,02 ^{a)}
IV-42	(4-) Cl	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,23 ^{a)}
IV-43	(4-) Cl	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,31 ^{a)}

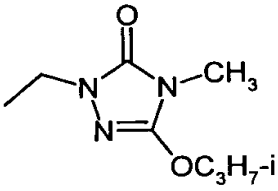
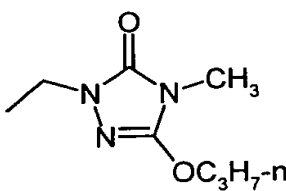
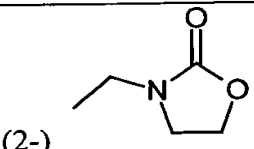
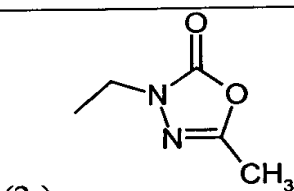
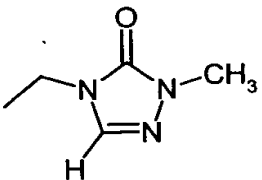
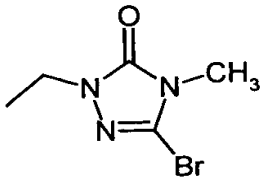
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-44	(4-) Cl	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,14 ^{a)}
IV-45	(4-) NO ₂	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,42 ^{a)}
IV-46	(4-) NO ₂	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,82 ^{a)}
IV-47	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,48 ^{a)}
IV-48	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,38 ^{a)}

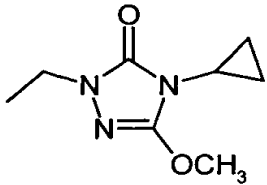
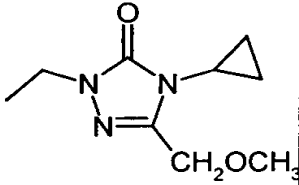
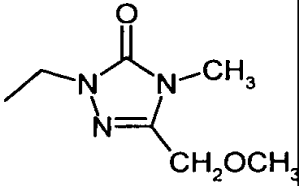
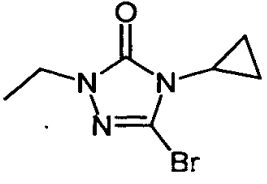
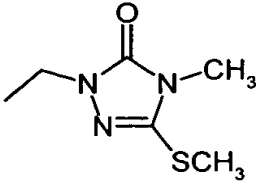
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-49	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,02 ^{a)}
IV-50	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₃ H ₇	logP = 3,91 ^{a)}
IV-51	(4-) OCH ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	
IV-52	(4-) OCH ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	
IV-53	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,37 ppm.

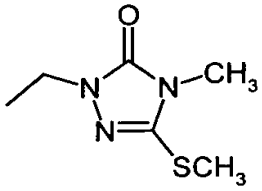
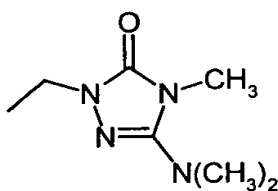
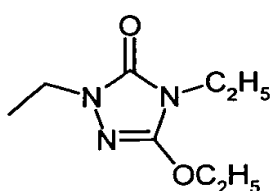
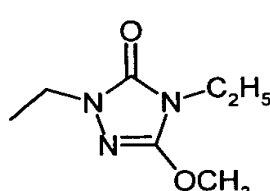
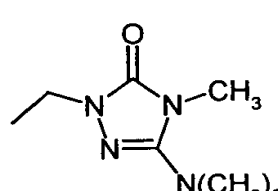
Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-54	(4-) CF_3	-	(2-) 	OC_2H_5	1H -NMR ($CDCl_3$, δ): 5,37 ppm.
IV-55	-	-	(2-) 	OC_2H_5	
IV-56	-	-	(2-) 	OC_2H_5	1H -NMR ($CDCl_3$, δ): 5,37 ppm.
IV-57	-	-	(2-) 	OC_2H_5	1H -NMR ($CDCl_3$, δ): 5,40 ppm.
IV-58	(4-) Br	-	(2-) 	OC_2H_5	$\log P = 2,95^a)$

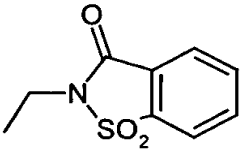
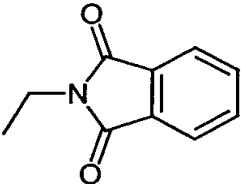
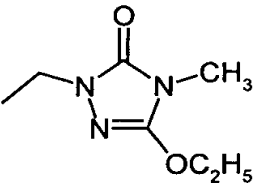
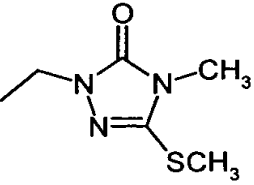
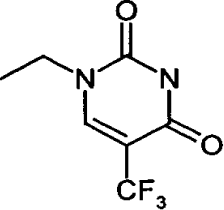
Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-59	(4-) Br	-	(2-) 	OC_2H_5	1H -NMR ($CDCl_3$, δ): 5,31 ppm.
IV-60	(4-) Br	-	(2-) 	OC_2H_5	$\log P = 2,44^a$
IV-61	(4-) F	-	(2-) 	OC_2H_5	1H -NMR ($CDCl_3$, δ): 5,35 ppm.
IV-62	(4-) F	-	(2-) 	OC_2H_5	1H -NMR ($CDCl_3$, δ): 5,53 ppm.
IV-63	(4-) F	-	(2-) 	OC_2H_5	1H -NMR ($CDCl_3$, δ): 5,40 ppm.
IV-64	(4-) F	-	(2-) 	OC_2H_5	1H -NMR ($CDCl_3$, δ): 5,36 ppm.

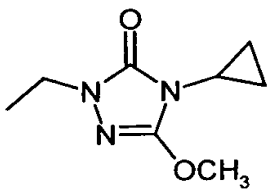
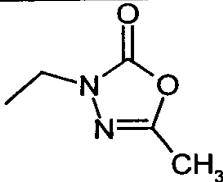
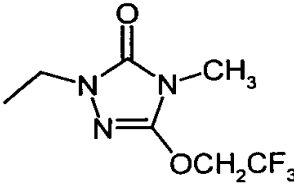
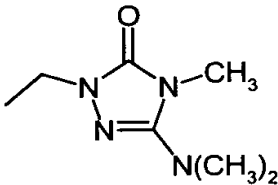
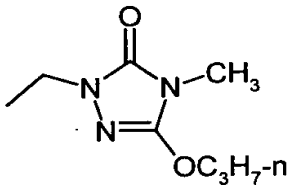
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-65	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,34 ^{a)}
IV-66	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,38 ^{a)}
IV-67	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,31 ^{a)}
IV-68	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,16 ^{a)}
IV-69	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,41 ^{a)}

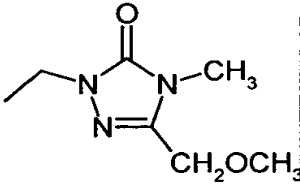
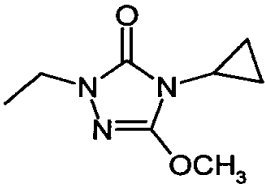
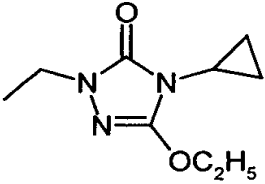
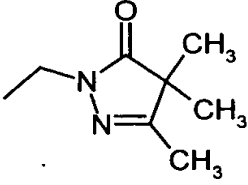
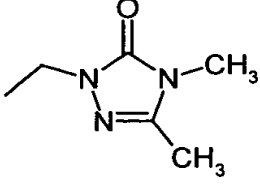
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-70	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,51 ^{a)}
IV-71	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 3,54 ^{a)}
IV-72	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,36 ^{a)}
IV-73	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,88 ^{a)}
IV-74	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,68 ^{a)}
IV-75	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,80 ^{a)}

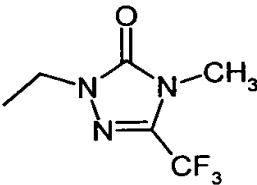
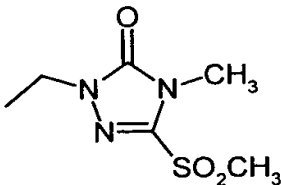
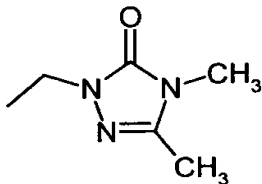
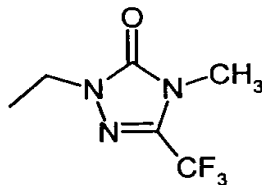
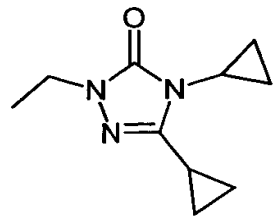
Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-76	(4-) CF_3	-	(3-) 	OC_2H_5	$\log P = 3,87^a)$
IV-77	(4-) CF_3	-	(2-) 	OC_2H_5	$\log P = 2,88^a)$
IV-78	(4-) CF_3	-	(2-) 	OC_2H_5	$\log P = 2,60^a)$
IV-79	(4-) CF_3	-	(2-) 	OC_2H_5	$\log P = 3,35^a)$
IV-80	(4-) Br	-	(2-) 	OC_2H_5	$\log P = 2,86^a)$

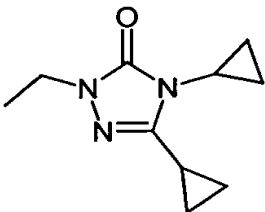
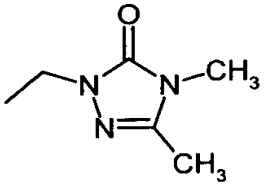
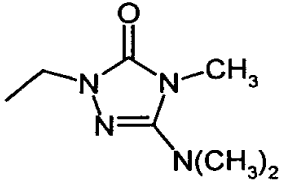
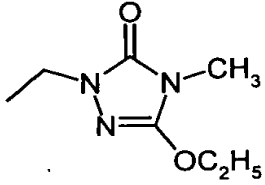
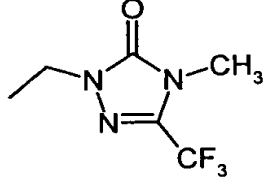
Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-81	(4-) Cl	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,83 ^{a)}
IV-82	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,60 ^{a)}
IV-83	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,36 ppm.
IV-84	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,37 ppm.
IV-85	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,79 ^{a)}

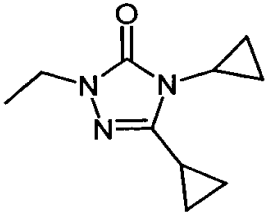
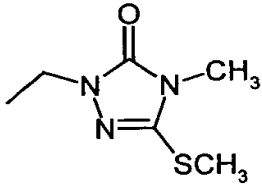
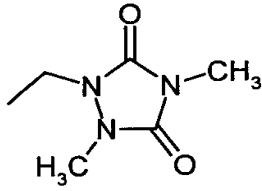
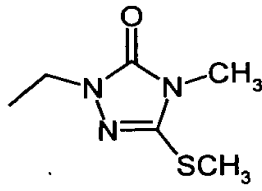
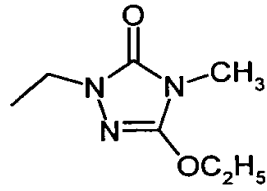
Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-86	(4-) CF_3	-	(2-) 	OC_2H_5	$\log P = 3,67^a$
IV-87	(4-) CF_3	-	(2-) 	OC_2H_5	$\log P = 3,80^a$
IV-88	(3-) CH_3	-	(2-) 	OC_2H_5	$\log P = 2,54^a$
IV-89	(4-) SO_2CH_3	-	(2-) 	OC_2H_5	$\log P = 1,82^a$
IV-90	(4-) CF_3	-	(2-) 	OC_2H_5	$\log P = 2,93^a$

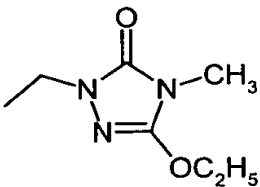
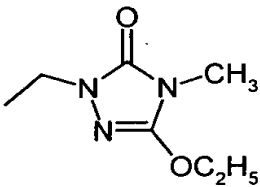
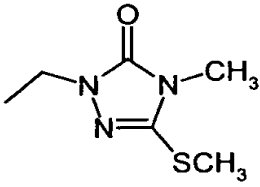
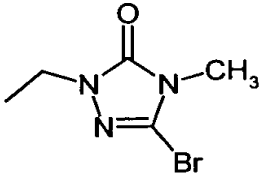
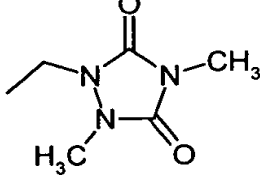
Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-91	(4-) CF_3	-	(2-) 	OC_2H_5	$\log P = 3,08^a$
IV-92	(4-) CF_3	-	(2-) 	OC_2H_5	$\log P = 3,04^a$
IV-93	(4-) CF_3	-	(2-) 	OC_2H_5	$\log P = 3,45^a$
IV-94	(4-) F	-	(2-) 	OC_2H_5	$\log P = 2,21^a$
IV-95	(4-) F	-	(2-) 	OC_2H_5	$\log P = 2,96^a$

Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-96	(4-) F	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,05 ^{a)}
IV-97	(4-) F	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,50 ^{a)}
IV-98	(4-) F	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,89 ^{a)}
IV-99	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,91 ^{a)}
IV-100	(4-) Cl	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,39 ppm.

Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-101	(4-) Cl	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,50 ppm.
IV-102	(4-) Cl	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,49 ppm.
IV-103	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,29 ppm.
IV-104	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,53 ppm.
IV-105	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,34 ppm.

Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-106	(4-) SO ₂ CH ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,39 ppm.
IV-107	(4-) SO ₂ CH ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,43 ppm.
IV-108	(4-) SO ₂ CH ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,40 ppm.
IV-109	(4-) SO ₂ CH ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,38 ppm.
IV-110	(4-) Br	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	¹ H-NMR (CDCl ₃ , δ): 5,49 ppm.

Bsp.- Nr.	(Position-) R^3	(Position-) $(R^4)_n$	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-111	-	-	(2-) 	OC_2H_5	1H -NMR ($CDCl_3$, δ): 5,3 ppm.
IV-112	-	-	(2-) 	OC_2H_5	1H -NMR ($CDCl_3$, δ): 5,44 ppm.
IV-113	(4-) CF_3	-	(2-) 	OC_2H_5	$\log P = 2,58^a$
IV-114	(4-) SO_2CH_3	-	(2-) 	OCH_3	$\log P = 1,53^a$
IV-115	(4-) SO_2CH_3	-	(2-) 	OCH_3	$\log P = 1,59^a$

Bsp.- Nr.	(Position-) R ³	(Position-) (R ⁴) _n	(Position-) -A-Z	X	Physikal. Daten
IV-116	(4-) I	-	(2-) 	OCH ₃	logP = 2,68 ^{a)}
IV-117	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OCH ₃	logP = 2,74 ^{a)}
IV-118	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OCH ₃	logP = 2,65 ^{a)}
IV-119	(4-) CF ₃	-	(2-) 	OC ₂ H ₅	logP = 2,96 ^{a)}
IV-120	-	-	(2-) 	OCH ₃	Fp.: 106°C

Die Bestimmung der in Tabelle 3 angegebenen logP-Werte erfolgte gemäß EEC-Directive 79/831 Annex V.A8 durch HPLC (High Performance Liquid Chromatography) an einer Phasenumkehrsäule (C 18). Temperatur: 43°C.

- (a) Eluenten für die Bestimmung im sauren Bereich: 0,1% wässrige Phosphorsäure, Acetonitril; linearer Gradient von 10% Acetonitril bis 90% Acetonitril - entsprechende Messergebnisse sind in Tabelle 1 mit a) markiert.
- 5
- (b) Eluenten für die Bestimmung im neutralen Bereich: 0,01-molare wässrige Phosphatpuffer-Lösung, Acetonitril; linearer Gradient von 10% Acetonitril bis 90% Acetonitril - entsprechende Messergebnisse sind in Tabelle 1 mit b) markiert.
- 10
- Die Eichung erfolgte mit unverzweigten Alkan-2-onen (mit 3 bis 16 Kohlenstoffatomen), deren logP-Werte bekannt sind (Bestimmung der logP-Werte anhand der Retentionszeiten durch lineare Interpolation zwischen zwei aufeinanderfolgenden Alkanonen).
- 15
- Die lambda-max-Werte wurden an Hand der UV-Spektren von 200 nm bis 400 nm in den Maxima der chromatographischen Signale ermittelt.

Anwendungsbeispiele:

Beispiel A

Pre-emergence-Test

5

Lösungsmittel: 5 Gewichtsteile Aceton

Emulgator: 1 Gewichtsteil Alkylarylpolyglykolether

10

Zur Herstellung einer zweckmäßigen Wirkstoffzubereitung vermischt man 1 Gewichtsteil Wirkstoff mit der angegebenen Menge Lösungsmittel, gibt die angegebene Menge Emulgator zu und verdünnt das Konzentrat mit Wasser auf die gewünschte Konzentration.

15

Samen der Testpflanzen werden in normalen Boden ausgesät. Nach ca. 24 Stunden wird der Boden so mit der Wirkstoffzubereitung besprüht, daß die jeweils gewünschte Wirkstoffmenge pro Flächeneinheit ausgebracht wird. Die Konzentration der Spritzbrühe wird so gewählt, daß in 1000 Liter Wasser pro Hektar die jeweils gewünschte Wirkstoffmenge ausgebracht wird.

20

Nach drei Wochen wird der Schädigungsgrad der Pflanzen bonitiert in % Schädigung im Vergleich zur Entwicklung der unbehandelten Kontrolle.

Es bedeuten:

25

0 % = keine Wirkung (wie unbehandelte Kontrolle)

100 % = totale Vernichtung

30

In diesem Test zeigen beispielsweise die Verbindungen gemäß Herstellungsbeispiel 2 und 3 bei guter Verträglichkeit gegenüber Kulturpflanzen, wie z.B. Mais, starke Wirkung gegen Unkräuter.

Beispiel B

Post-emergence-Test

- 5 Lösungsmittel: 5 Gewichtsteile Aceton
Emulgator: 1 Gewichtsteil Alkylarylpolyglykolether

10

Zur Herstellung einer zweckmäßigen Wirkstoffzubereitung vermischt man 1 Gewichtsteil Wirkstoff mit der angegebenen Menge Lösungsmittel, gibt die angegebene Menge Emulgator zu und verdünnt das Konzentrat mit Wasser auf die gewünschte Konzentration.

15

Mit der Wirkstoffzubereitung spritzt man Testpflanzen, welche eine Höhe von 5 - 15 cm haben so, daß die jeweils gewünschten Wirkstoffmengen pro Flächeneinheit ausgebracht werden. Die Konzentration der Spritzbrühe wird so gewählt, daß in 1000 l Wasser/ha die jeweils gewünschten Wirkstoffmengen ausgebracht werden.

20

Nach drei Wochen wird der Schädigungsgrad der Pflanzen bonitiert in % Schädigung im Vergleich zur Entwicklung der unbehandelten Kontrolle.

Es bedeuten:

0 % = keine Wirkung (wie unbehandelte Kontrolle)

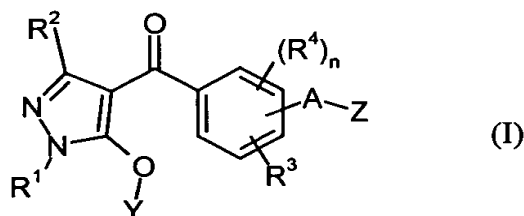
100 % = totale Vernichtung

25

In diesem Test zeigen beispielsweise die Verbindungen gemäß Herstellungsbeispiel 2 und 3 starke Wirkung gegen Unkräuter.

Patentansprüche

1. Substituierte Benzoylpyrazole der allgemeinen Formel (I),



in welcher

n für die Zahlen 0, 1, 2 oder 3 steht,

A für eine Einfachbindung oder für Alkandiyl (Alkylen) steht,

R¹ für jeweils gegebenenfalls substituiertes Alkyl, Alkenyl, Alkynyl oder Cycloalkyl steht,

R² für Wasserstoff, Cyano, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, oder für jeweils gegebenenfalls substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylthio, Alkoxycarbonyl oder Cycloalkyl steht,

R³ für Wasserstoff, Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, oder für jeweils gegebenenfalls substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylthio, Alkylsulfinyl, Alkylsulfonyl, Alkylamino, Dialkylamino oder Dialkylaminosulfonyl steht,

R⁴ für Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, oder für jeweils gegebenenfalls substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylthio, Alkylsulfinyl, Alkylsulfonyl, Alkylamino, Dialkylamino oder Dialkylaminosulfonyl steht,

Y für Wasserstoff oder für jeweils gegebenenfalls substituiertes Alkyl, Alkylcarbonyl, Alkoxycarbonyl, Alkylsulfonyl, Alkylaminocarbonyl, Dialkylaminocarbonyl, Alkenyl, Alkenylcarbonyl, Alkenylsulfonyl, Alkynyl, Alkynylcarbonyl, Cycloalkyl, Cycloalkylcarbonyl, Cycloalkylalkyl, Phenylcarbonyl, Phenylsulfonyl, Phenylalkyl oder Phenylcarbonylalkyl steht, und

Z für eine gegebenenfalls substituierte 4- bis 12-gliedrige, gesättigte oder ungesättigte, monocyclische oder bicyclische, heterocyclische Gruppierung steht, welche 1 bis 4 Heteroatome (bis zu 4 Stickstoffatome und gegebenenfalls - alternativ oder additiv - ein Sauerstoffatom oder ein Schwefelatom, oder eine SO-Gruppierung oder eine SO₂-Gruppierung) enthält, und welche zusätzlich ein bis drei Oxo-Gruppen (C=O) und/oder Thioxo-Gruppen (C=S) als Bestandteile des Heterocyclus enthält,

einschließlich aller möglichen tautomeren Formen und der möglichen Salze.

2. Verbindungen gemäß Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, daß

n für die Zahlen 0, 1 oder 2 steht,

A für eine Einfachbindung oder für Alkandiyl (Alkylen) mit 1 bis 4 Kohlenstoffatomen steht,

R¹ für gegebenenfalls durch Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Halogen, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkyl-carbonyl, C₁-C₄-Alkoxy-carbonyl, C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Alkylsulfinyl oder C₁-C₄-Alkylsulfonyl substituiertes Alkyl mit 1 bis 6 Kohlenstoffatomen, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Halogen oder C₁-C₄-Alkoxy-

carbonyl substituiertes Alkenyl oder Alkynyl mit jeweils 2 bis 6 Kohlenstoffatomen, oder für gegebenenfalls durch Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Halogen, C₁-C₄-Alkyl oder C₁-C₄-Alkoxy-carbonyl substituiertes Cycloalkyl mit 3 bis 6 Kohlenstoffatomen steht,

5

R² für Wasserstoff, Cyano, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Halogen oder C₁-C₄-Alkoxy substituiertes Alkyl, Alkoxy oder Alkoxycarbonyl mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen, für gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Alkylthio mit 1 bis 6 Kohlenstoffatomen, oder für gegebenenfalls durch Cyano, Halogen oder C₁-C₄-Alkyl substituiertes Cycloalkyl mit 3 bis 6 Kohlenstoffatomen steht,

10

R³ für Wasserstoff, Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Alkylsulfinyl oder C₁-C₄-Alkylsulfonyl substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylthio, Alkylsulfinyl oder Alkylsulfonyl mit jeweils bis zu 4 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen, oder für Alkylamino, Dialkylamino oder Dialkylaminosulfonyl mit jeweils bis zu 4 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen steht,

15

20

R⁴ für Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Alkylsulfinyl oder C₁-C₄-Alkylsulfonyl substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylthio, Alkylsulfinyl oder Alkylsulfonyl mit jeweils bis zu 4 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen, oder für Alkylamino, Dialkylamino oder Dialkylaminosulfonyl mit jeweils bis zu 4 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen steht,

25

30

Y für Wasserstoff, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Halogen oder C₁-C₄-Alkoxycarbonyl substituiertes Alkyl,

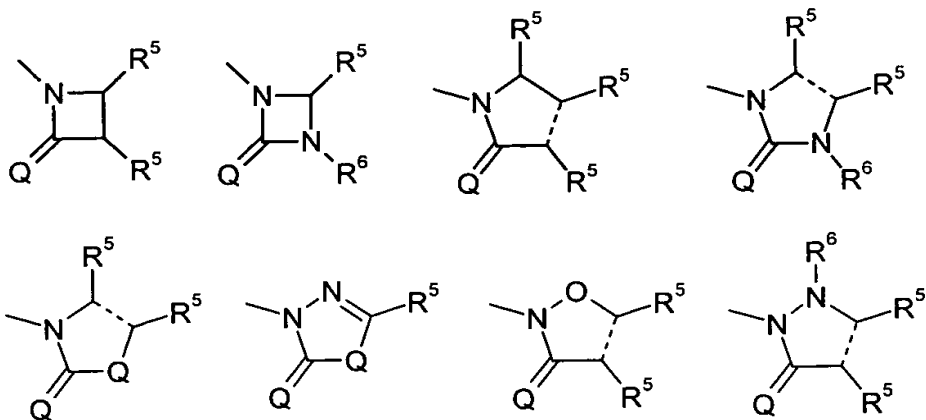
5

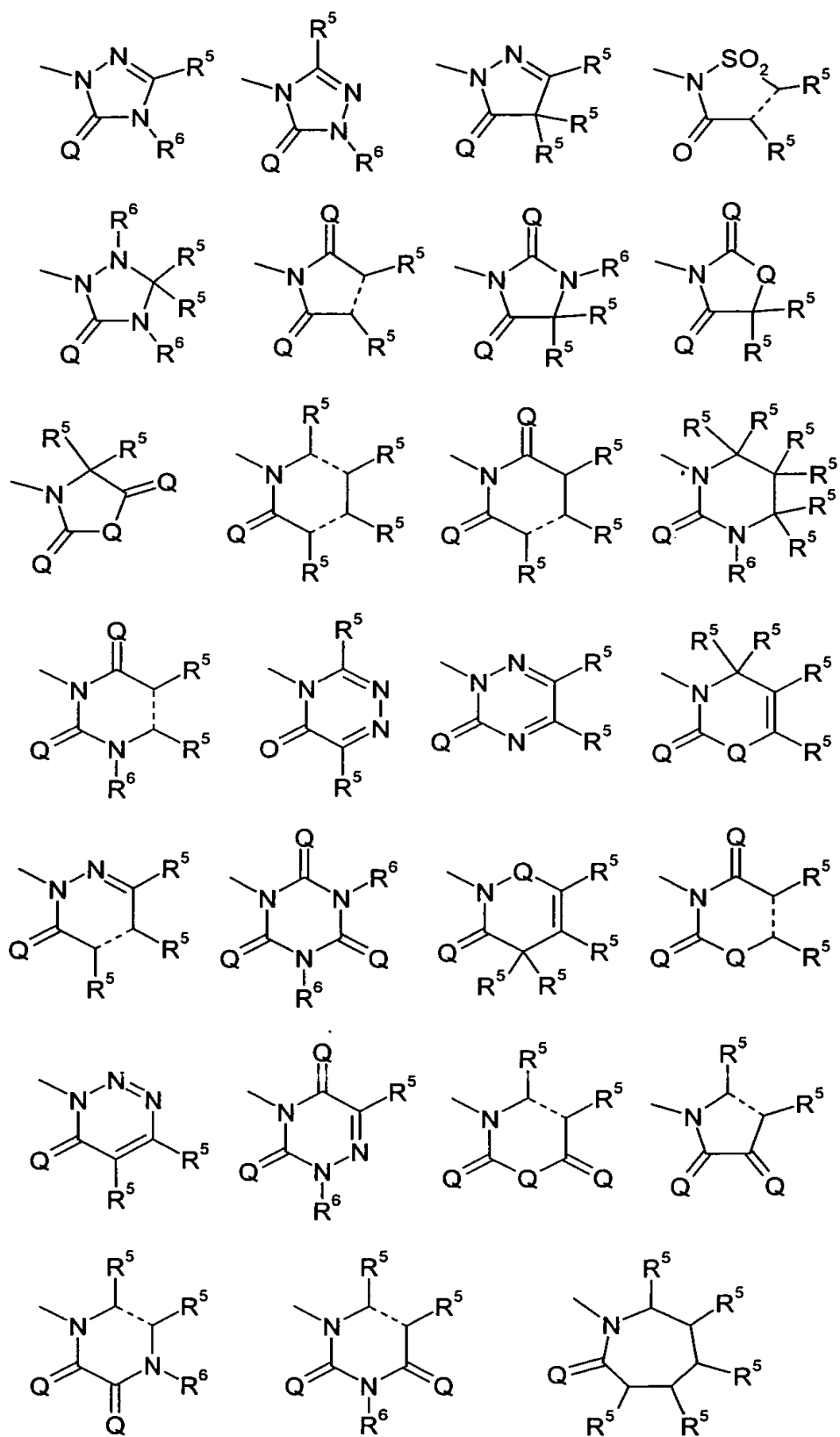
Alkylcarbonyl oder Alkoxycarbonyl mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Alkylsulfonyl, Alkylaminocarbonyl oder Dialkylaminocarbonyl mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Halogen oder C₁-C₄-Alkoxy-carbonyl substituiertes Alkenyl, Alkenylcarbonyl, Alkinyl oder Alkinylcarbonyl mit jeweils 2 bis 6 Kohlenstoffatomen, für gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Alkenylsulfonyl mit bis zu 6 Kohlenstoffatomen für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Halogen oder C₁-C₄-Alkyl substituiertes Cycloalkyl, Cycloalkylcarbonyl oder Cycloalkylalkyl mit jeweils 3 bis 6 Kohlenstoffatomen in den Cycloalkylgruppen und gegebenenfalls 1 bis 3 Kohlenstoffatomen im Alkylteil, oder für jeweils gegebenenfalls durch Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Halogen, C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy oder C₁-C₄-Halogenalkoxy substituiertes Phenylcarbonyl, Phenylsulfonyl, Phenyl-C₁-C₄-alkyl oder Phenylcarbonyl-C₁-C₄-alkyl steht, und

15

Z für eine der nachstehenden heterocyclischen Gruppierungen steht

20





worin jeweils die gestrichelt gezeichnete Bindung eine Einfachbindung oder eine Doppelbindung ist,

5

Q für Sauerstoff oder Schwefel steht,

10

R⁵ für Wasserstoff, Hydroxy, Mercapto, Cyano, Halogen, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Halogen, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Alkylsulfinyl oder C₁-C₄-Alkylsulfonyl substituiertes Alkyl, Alkylcarbonyl, Alkoxy, Alkoxy-carbonyl, Alkylthio, Alkylsulfinyl oder Alkylsulfonyl mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen, für Propadienylthio, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Alkylamino oder Dialkylamino mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Alkenyl, Alkinyl, Alkenyloxy, Alkenylthio oder Alkenylamino mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen in den Alkenyl- bzw. Alkinylgruppen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Cycloalkyl, Cycloalkyloxy, Cycloalkylthio, Cycloalkylamino, Cycloalkylalkyl, Cycloalkylalkoxy, Cycloalkylalkylthio oder Cycloalkylalkylamino mit jeweils 3 bis 6 Kohlenstoffatomen in den Cycloalkylgruppen und gegebenenfalls bis zu 4 Kohlenstoffatomen im Alkylteil, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen, C₁-C₄-Alkyl oder C₁-C₄-Alkoxy substituiertes Phenyl, Phenylloxy, Phenylthio, Phenylamino, Benzyl, Benzyl-oxy, Benzylthio oder Benzylamino steht, für Pyrrolidino, Piperidino oder Morpholino steht, oder - für den Fall, daß zwei benachbarte Reste R⁵ und R⁵ sich an einer Doppelbindung befinden - zusammen mit dem benachbarten Rest R⁵ auch für eine Benzogruppierung steht, und

15

20

25

30

R⁶ für Wasserstoff, Hydroxy, Amino, Alkylidenamino mit bis zu 4 Kohlenstoffatomen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen oder C₁-C₄-Alkoxy substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylamino, Dialkylamino oder Alkanoylamino mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen in den Alkylgruppen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Alkenyl, Alkinyl oder Alkenyloxy mit jeweils bis zu 6 Kohlenstoffatomen in den Alkenyl- bzw. Alkinylgruppen, für jeweils gegebenenfalls durch Halogen substituiertes Cycloalkyl, Cycloalkylalkyl oder Cycloalkylamino mit jeweils 3 bis 6 Kohlenstoffatomen in den Cycloalkylgruppen und gegebenenfalls bis zu 3 Kohlenstoffatomen im Alkylteil, oder für jeweils gegebenenfalls durch Halogen, C₁-C₄-Alkyl oder C₁-C₄-Alkoxy substituiertes Phenyl oder Benzyl steht, oder zusammen mit einem benachbarten Rest R⁵ oder R⁶ für gegebenenfalls durch Halogen oder C₁-C₄-Alkyl substituiertes Alkandiyl mit 3 bis 5 Kohlenstoffatomen steht,

wobei die einzelnen Reste R⁵ und R⁶ - soweit mehrere davon an gleiche heterocyclische Gruppierungen gebunden sind, gleiche oder verschiedene Bedeutungen im Rahmen der obigen Definition haben können.

3. Verbindungen gemäß Anspruch 1 oder 2, dadurch gekennzeichnet, daß

n für die Zahlen 0 oder 1 steht,

A für eine Einfachbindung, Methylen, Ethylen (Ethan-1,1-diyl) oder Dimethylen (Ethan-1,2-diyl) steht,

- 5 R¹ für jeweils gegebenenfalls durch Fluor, Chlor, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, n- oder i-Propylsulfinyl, Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n- oder i-Propylsulfonyl substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor, Chlor oder Brom substituiertes Propenyl, Butenyl, Propinyl oder Butinyl, oder für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Fluor, Chlor, Brom, Methyl oder Ethyl substituiertes Cyclopropyl, Cyclobutyl, Cyclopentyl oder Cyclohexyl steht,
- 10 R² für Wasserstoff, Cyano, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Fluor, Chlor, Methoxy oder Ethoxy substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, Methoxycarbonyl, Ethoxycarbonyl, n- oder i-Propoxycarbonyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor substituiertes Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, oder für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Fluor, Chlor, Brom, Methyl oder Ethyl substituiertes Cyclopropyl, Cyclobutyl, Cyclopentyl oder Cyclohexyl steht,
- 15 R³ für Wasserstoff, Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Fluor, Chlor, Brom, Iod, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, Methylsulfonyl oder Ethylsulfonyl substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy substituiertes Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor substituiertes Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, n- oder i-Propylsulfinyl, Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n- oder i-Propylsulfonyl, oder für Me-
- 20
- 25
- 30

thylamino, Ethylamino, n- oder i-Propylamino, Dimethylamino, Diethylamino, Dimethylaminosulfonyl oder Diethylaminosulfonyl steht,

5 R⁴ für Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Fluor, Chlor, Brom, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, Methylsulfonyl oder Ethylsulfonyl substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy substituiertes Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor und/oder Chlor substituiertes Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, n- oder i-Propylsulfinyl, Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n- oder i-Propylsulfonyl, oder für Methylamino, Ethylamino, n- oder i-Propylamino, Dimethylamino, Diethylamino, Dimethylaminosulfonyl oder Diethylaminosulfonyl steht,

20 R⁵ für Wasserstoff, Hydroxy, Chlor, Brom, Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, Difluormethyl, Dichlormethyl, Trifluormethyl, Trichlormethyl, Chlordifluormethyl, Fluordichlormethyl, Fluorethyl, Chlorethyl, Difluorethyl, Dichlorethyl, Fluor-n-propyl, Fluor-i-propyl, Chlor-n-propyl, Chlor-i-propyl, Methoxymethyl, Ethoxymethyl, Methoxyethyl, Ethoxyethyl, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, n-, i-, s- oder t-Butoxy, Fluorethoxy, Chlorethoxy, Difluorethoxy, Dichlorethoxy, Trifluorethoxy, Trichlorethoxy, Chlorfluorethoxy, Chlordifluorethoxy, Fluordichlorethoxy, Methylthio, Ethylthio, n- oder i-Propylthio, Fluorethylthio, Chlorethylthio, Difluorethylthio, Dichlorethylthio, Chlorfluorethylthio, Chlordifluorethylthio, Fluordichlorethylthio, Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, n- oder i-Propylsulfinyl, Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n- oder i-Propylsulfonyl, Dimethylamino, Propenylthio, Butenylthio, Propinylthio, Butinylthio,

Cyclopropyl, Cyclopropylmethyl, Cyclopropylmethoxy, Phenyl oder Phenoxy steht,

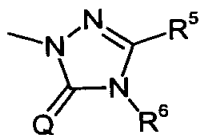
5 R⁶ für Amino, Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, Methoxy, Ethoxy, Methylamino, Dimethylamino, Cyclopropyl oder Cyclopropylmethyl steht, oder zusammen mit R⁵ für Propan-1,3-diyl (Trimethylen), Butan-1,4-diyl (Tetramethylen) oder Pentan-1,5-diyl (Pentamethylen) steht, und

10 Y für Wasserstoff, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Fluor, Chlor, Methoxy oder Ethoxy substituiertes Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, Acetyl, Propionyl, n- oder i-Butyryl, Methoxycarbonyl oder Ethoxycarbonyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor, Chlor und/oder Brom substituiertes Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n- oder i-Propylsulfonyl, n-, i-, s- oder t-Butylsulfonyl, Methylaminocarbonyl, Ethylaminocarbonyl, n- oder i-Propylaminocarbonyl, Dimethylaminocarbonyl oder Diethylaminocarbonyl, für jeweils gegebenenfalls durch Fluor, Chlor oder Brom substituiertes Propenyl, Butenyl, Propenylcarbonyl, Butenylcarbonyl, Propenylsulfonyl, Butenylsulfonyl, Propinyl, Butinyl, Propinylcarbonyl oder Butinylcarbonyl, für jeweils gegebenenfalls durch Cyano, Fluor, Chlor, Methyl oder Ethyl substituiertes Cyclopropyl, Cyclobutyl, Cyclopentyl, Cyclohexyl, Cyclopropylcarbonyl, Cyclobutylcarbonyl, Cyclopentylcarbonyl, Cyclohexylcarbonyl, Cyclopropylmethyl, Cyclobutylmethyl, Cyclopentylmethyl oder Cyclohexylmethyl, oder für jeweils gegebenenfalls durch Nitro, Cyano, Fluor, Chlor, Brom, Methyl, Ethyl, n- oder i-Propyl, n-, i-, s- oder t-Butyl, Trifluormethyl, Methoxy, Ethoxy, n- oder i-Propoxy, Difluormethoxy oder Trifluormethoxy substituiertes Phenylcarbonyl, Phenylsulfonyl, Benzyl oder Phenylcarbonylmethyl steht.

30

4. Verbindungen gemäß einem der Ansprüche 1 bis 3, dadurch gekennzeichnet, daß

Z für die folgende Gruppierung steht



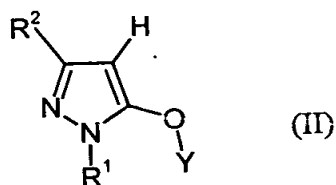
5. Verbindungen gemäß einem der Ansprüche 1 bis 4, dadurch gekennzeichnet, daß

Q für Sauerstoff steht.

6. Verbindungen gemäß einem der Ansprüche 1 bis 5, dadurch gekennzeichnet, daß n für 0 steht.

7. Verfahren zum Herstellen von Verbindungen gemäß einem der Ansprüche 1 bis 6, dadurch gekennzeichnet, daß man

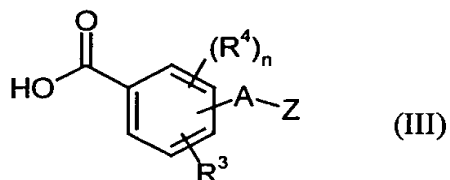
(a) Pyrazole der allgemeinen Formel (II)



in welcher

R^1 , R^2 und Y die in einem der Ansprüche 1 bis 3 angegebene Bedeutung haben,

mit substituierten Benzoesäuren der allgemeinen Formel (III),



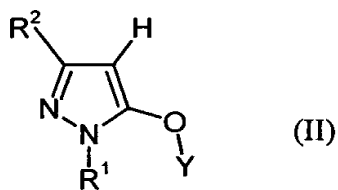
in welcher

5 n, A, R³, R⁴ und Z die in einem der Ansprüche 1 bis 6 angegebene Bedeutung haben,

in Gegenwart eines Dehydratisierungsmittels, gegebenenfalls in Gegenwart eines oder mehrerer Reaktionshilfsmittel und gegebenenfalls in Gegenwart eines Verdünnungsmittels umsetzt,

oder daß man

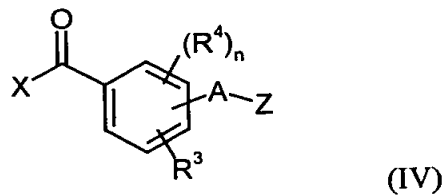
(b) Pyrazole der allgemeinen Formel (II)



in welcher

20 R¹, R² und Y die in einem der Ansprüche 1 bis 3 angegebene Bedeutung haben,

mit substituierten Benzoessäurederivaten der allgemeinen Formel (IV)



in welcher

n, A, R³, R⁴ und Z die in einem der Ansprüche 1 bis 6 angegebene Bedeutung haben, und

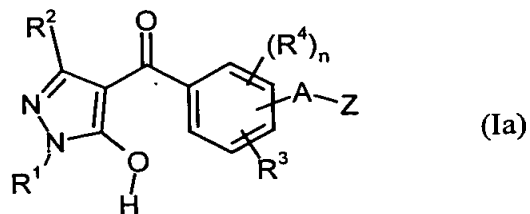
X für Cyano, Halogen oder Alkoxy steht,

- oder mit entsprechenden Carbonsäureanhydriden -

gegebenenfalls in Gegenwart eines oder mehrerer Reaktionshilfsmittel und gegebenenfalls in Gegenwart eines Verdünnungsmittels umgesetzt,

oder daß man

(c) substituierte Benzoylpyrazole der allgemeinen Formel (Ia)



in welcher

n, A, R¹, R², R³, R⁴ und Z die in einem der Ansprüche 1 bis 6 angegebene Bedeutung haben,

mit Verbindungen der allgemeinen Formel (V)

H-Y (V)

in welcher

5 Y mit Ausnahme von Wasserstoff die in einem der Ansprüche 1 bis 4 angegebene Bedeutung hat,

- oder gegebenenfalls mit entsprechenden Isocyanaten oder Isothiocyanaten -

10

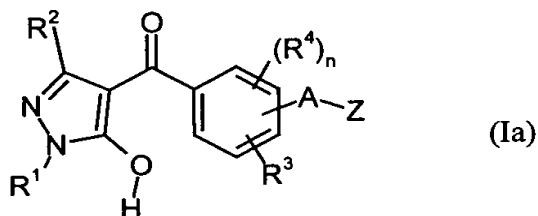
gegebenenfalls in Gegenwart eines oder mehrerer Reaktionshilfsmittel und gegebenenfalls in Gegenwart eines Verdünnungsmittels umsetzt,

15

und gegebenenfalls im Anschluß daran an den so erhaltenen Verbindungen der Formel (I) im Rahmen der Substituentendefinition auf übliche Weise elektrophile oder nucleophile bzw. Oxidations- oder Reduktionsreaktionen durchführt oder die Verbindungen der Formel (I) auf übliche Weise in Salze überführt.

20

8. Verbindungen der allgemeinen Formel (Ia)



in welcher

25

n, A, R¹, R², R³, R⁴ und Z die in einem der Ansprüche 1 bis 6 angegebene Bedeutung haben.

9. Herbizide Mittel, gekennzeichnet durch den Gehalt mindestens einer Verbindung gemäß einem der Ansprüche 1 bis 6 und üblichen Streckmitteln.
10. Verwendung von mindestens einer Verbindung gemäß einem der Ansprüche
5 1 bis 6 zur Bekämpfung von unerwünschten Pflanzen.

- R⁴ für Nitro, Cyano, Carboxy, Carbamoyl, Thiocarbamoyl, Halogen, oder für jeweils gegebenenfalls substituiertes Alkyl, Alkoxy, Alkylthio, Alkylsulfinyl, Alkylsulfonyl, Alkylamino, Dialkylamino oder Dialkylaminosulfonyl steht,
- Y für Wasserstoff oder für jeweils gegebenenfalls substituiertes Alkyl, Alkylcarbonyl, Alkoxycarbonyl, Alkylsulfonyl, Alkylaminocarbonyl, Dialkylaminocarbonyl, Alkenyl, Alkenylcarbonyl, Alkenylsulfonyl, Alkinyl, Alkinylcarbonyl, Cycloalkyl, Cycloalkylcarbonyl, Cycloalkylalkyl, Phenylcarbonyl, Phenylsulfonyl, Phenylalkyl oder Phenylcarbonylalkyl steht, und
- Z für eine gegebenenfalls substituierte 4- bis 12-gliedrige, gesättigte oder ungesättigte, monocyclische oder bicyclische, heterocyclische Gruppierung steht, welche 1 bis 4 Heteroatome (bis zu 4 Stickstoffatome und gegebenenfalls - alternativ oder additiv - ein Sauerstoffatom oder ein Schwefelatom, oder eine SO-Gruppierung oder eine SO₂-Gruppierung) enthält, und welche zusätzlich ein bis drei Oxo-Gruppen (C=O) und/oder Thioxo-Gruppen (C=S) als Bestandteile des Heterocyclus enthält,

sowie Verfahren zu ihrer Herstellung und ihre Verwendung als Herbizide.

.